

307.226

10

27  
1979

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

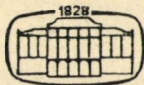
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR  
ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
PÁL LÉNÁRD

XXVII. KÖTET

1. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1979

9



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetemi tanár

Biofizikai Intézet

1444 Budapest VIII Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 72 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTURA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölik. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.





SZALAY SÁNDOR



MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADEMIA  
KÖNYVTÁRA



## KÖSZÖNTŐ

TARJÁN IMRE  
az MTA rendes tagja

Ebben az évben tölti be *Szalay Sándor* 70. életévét. Tisztelettel köszönti Öt ebből az alkalomból a magyar tudós társadalom.

Egy gazdag életút figyelemmel kísérése érdekes és tanulságos még akkor is, ha a Magyar Fizikai Folyóirat ez ünnepi számában csak a leglényegesebb vonások áttekintésére van lehetőség. Tanulságos ugyanis egy sokoldalú, alkotó egyéniség gondolkodásának, a problémákhoz való hozzáállásának, egész életvitelének megismerése, de érdekes az áttekintés azért is, mert az életút korszakot is jellemez. Fölismerhetők az időszerű tudományos kérdések, kutatási irányok és lehetőségek, a műszaki és gazdasági fejlettség, a társadalmi igények, sőt következtetni lehet az általános tudománypolitikai és kulturális helyzetre is.

Az adottságok és a környezeti hatások együtt alakítják ki a személyiséget, ezt példázza Szalay Sándor élete és pályafutása is. Szalay kifejezetten kísérleti kutató. A fizika iránti érdeklődését a családból hozta magával. Édesapja mellett a nyíregyházi gimnáziumban már a kisdíák olyan manuális készségre, experimentális élményre tett szert, amilyenekkel akkor a legtöbb fizikus tanárjelölt az egyetemi évek után sem rendelkezett. Tangl Károlynál szerzett doktori címet, majd több külföldi tanulmányúton vett részt. Ezek közül különösen meghatározó volt további pályafutására az a 8 hónap, amit 1936-ban Rutherford mellett töltött el. Ezt követően 4 éven át Gyulai Zoltán tanársegédjeként Debrecenben működött az akkor még orvostudományi fizikai intézetben. A fizika különböző területeit kutatták, de az experimentálás mint fundamentális kutatási módszer és mint a jó oktatás nélkülözhetetlen feltétele, közös szemléleti alapot biztosított a jó munkatársi, később pedig baráti viszonyhoz. 1940-ben szerzett egyetemi magántanári címet, és még ebben az évben nyert tanszékvezető egyetemi tanári kinevezést a debreceni intézethez a Kolozsvárra távozó Gyulai utódjaként. Ekkor vette kezdetét az ő vezetésével és aktív részvételével az a tevékenység, amely azután 1954-től egy jelentős tudományos intézet, a Magyar Tudományos Akadémia Atommag Kutató Intézete (ATOMKI) kifejlődéséhez vezetett. 1952-ben kapott Kossuth-díjat, 1953-ban lett az Akadémia levelező, majd 1965-ben rendes tagja. Számos más hazai és külföldi kitüntetés is jelzi munkájának elismerését. Ezek közül is kiemelkedik az 1978-ban kapott Állami Díj.

Hazai viszonylatban úttörőek és nemzetközileg is értékesek voltak a 30-as évek végén elért kísérleti magfizikai eredményei, de kutatói és nevelői egyéniségének kibontakozása csak a felszabadulástól számítható. Egyes negatív vélemények ellenére 1947-ben kezdeményezte a hazai uránkutatókat. Az irodalmi adatok szerint az elsők között észlelt szénben uránelfordulást, és az összes hazai szénbányákra kiterjedő vizsgálata után sikerült a feldúsulás okát is felderítenie. Kimutatta, hogy a korhadó



növényi szerves anyagból keletkező humuszsavak az uránt még rendkívül kis koncentrációjú oldatból is megkötik. Magyarországon is így dúsult fel az urán jelentős mértékben a Dunántúl egyes széntelepeiben. Vizsgálatai alapján kormánysszerveinknek javasolta az uránkutatások fokozását, és az ipari vonalon is megindult nagyarányú kutatások 1954-ben a hazai uránkincs felfedezéséhez vezettek.

Az urándúsulás törvényszerűségéről kiderítette, hogy az egy általánosabb geokémiai törvény része. Megállapította ui., hogy az oldhatatlan humuszsavak sok más fémeket is képesek a természetben igen híg oldatokból feldúsítani. A fosszilis szerves anyagokban (szén, szénpala, olajpalák, tőzeg stb.) előforduló fémfeldúsulások nagy részét az általa felfedezett törvényszerűség megmagyarázza. Felismerései külföldön nagy visszhangot keltettek, és több uránelőfordulás felfedezéséhez, ill. megértéséhez vezettek.

Tőzeges talajokban a nyomfémek, a tőzegen történő nagymérvű szorpciójuk következtében, a vízből gyakorlatilag eltűnnek. Így sikerült a növényeknek tőzeges talajokon megfigyelhető nyomelemhiányait megmagyarázni. A kezdeményezésére végzett vizsgálatok megállapították, hogy a szokásos növénytaplálási módszerek tőzeges talajon a növényzet számára hatástalanok, permetezéssel viszont a hiányok pótolhatók.

Munkatársaival az utóbbi években új technikát és mérési eljárást dolgozott ki, amely lehetővé teszi, hogy kőzetekből szobahőmérsékleten zúzással felszabadítsuk a kőzetekben még keletkezésük alkalmával bezárt gázokat és azokat meganalizáljuk. Az eddig megvizsgált 2,8—3,6 milliárd éves kőzetek gázzárványai szabad oxigént nem tartalmaztak, viszont kimutatható volt bennük hidrogén, metán, nitrogén, víz, argon és több-kevesebb széndioxid, tehát redukáló sajátágú gázok és gőzök, ami összhangban van a primordiális atmoszférára vonatkozó előzetes feltevésekkel. Érdeklődéssel várjuk a további vizsgálatokat, amelyek a később keletkezett üledékes kőzetekre vonatkoznak, és segítenek majd választ adni arra a kérdésre, hogy mikor alakult ki a Föld jelenlegi, oxigénben gazdag légköre.

Közben a kísérleti magfizikát is több eredeti elgondolással gazdagította, amelyeket fiatal munkatársaival valósított meg, pl. a toroidszektor-fokuszálású béta-spektrométert (Berényi Dénessel) és a neutrino visszalökő hatásának Wilson-kamrával való lefotografálását (Csikai Gyulával). Tevékenyen részt vett az ATOMKI-ban folyó gyorsítófejlesztés kutatási irányainak kitűzésében, és több elgondolásának (pl. konstrukciós alapelvek, elektródgeometria módosítása stb.) sikeres megvalósítása nemzetközi visszhangot keltett.

Kezdeményezte a magfizika fejlett módszereinek más tudományokban való alkalmazását és az ATOMKI-ban ilyen tudományos osztályt is létesített. Értékes (hazánkban úttörő) eredményeket ért el ez az osztály a tömegspektrométeres geokronológiában. A hazai geológia igényli az ATOMKI geokronológiai laboratóriumának munkáját.

Szalay kezdeményezésére Debrecenben 1952 óta folyik rendszeresen a bioszférában levő radioaktivitás vizsgálata, ennek keretében a hasadási termékeknek a légköri csapadéokban való rendszeres és folyamatos megfigyelése. Kezdeményezése a ma már rutinszerűen folyó hazai ellenőrző szolgálat alapjául szolgált.

Még a 40-es évek végén kezdeményezte hazánkban a radioaktív izotópok nyomjelzőként való használatát az orvosi biológiai kutatásban. Az általa létesített kutatócsoport elsősorban a Debreceni Orvostudományi Egyetem intézeteivel és klinikáival együttműködésben több figyelemre méltó eredményt ért el. A kutatómunka során szá-



mos műszertехnikai és metodikai eredmény is született. A hazánkban 1950 körül induló izotóplaboratóriumok munkatársainak tekintélyes része itt nyerte első kiképzését.

Napjainkban egy tudományos kutató általában a specializálódás felé halad a témaválasztásban és a módszerekben egyaránt. Szalay Sándor problémafölvetéseit viszont széles látókör és sokoldalúság jellemzi. Ugyancsak sokoldalú az experimentális eszköztára is, ami nemcsak a fizika különböző területein mutatkozik meg alkotó módon, hanem otthonosan mozog a kémiai módszerekben, az elektronikában is, és mindez széles körű anyagismerettel, gyakorlati és műszaki érzékkel is ötvöződik. E tulajdonságokat erős kritikai érzék egészíti ki, amivel kutatási eredményeit elemzi, hogy azok kétségbevonhatatlanok legyenek. Hipotézisek felállításában óvatos, de ugyanakkor törekszik mélyebb törvényszerűségek föltárására.

Szalay Sándor nemcsak tudományos eredményei révén szolgálja a jövőt, hanem az új fizikusok nevelésén keresztül is építi azt. A fiatalokkal hivatásszerűen foglalkozott és törődik ma is. A tanszék és az ATOMKI az az iskola, ahol már a tanítványok is mesterek és nevelik az újabb generációkat.

További alkotó tevékenységéhez sok erőt és újabb sikereket kívánunk.







# SZALAY SÁNDOR ÉS A MAGYAR KÍSÉRLETI MAGFIZIKA

LOVAS ISTVÁN

A kísérleti magfizikának Magyarországon a harmincas évekig gyakorlatilag egyetlen képviselője sem volt. Rutherford munkatársaként Szalay Sándor csupán néhány hónapot dolgozott az akkor már világhírű Cavendish Laboratóriumban. Ez a rövid idő is elég volt azonban ahhoz, hogy felismerje a tudományos fejlődés fő tendenciáját. Azzal az elhatározással tért haza Debrecenbe, hogy a kísérleti magfizikát meghonosítja. (Érdemes emlékeztetni, hogy ez a fajta célkitűzés és feladatvállalás a debreceni Universitáson már több évszázados hagyomány.) Az a kézirat, amely az első, hazai földön végzett magfizikai kísérlet eredményeit tartalmazta, 1939. január 2-án érkezett meg a Zeitschrift für Physik szerkesztőségébe, a következő címmel

„Die Anregungsfunktionen der Umwandlungen  $_{18}\text{Al}^{27}(\alpha, n)$ ,  $_{15}\text{P}^{30}$  und  $_{5}\text{B}^{10}(\alpha, n)$ ,  $_{7}\text{N}^{13}$ ”.

Figyelemre méltó az aláírás módja: *A. Szalay aus Debrecen, Ungarn.*

Ez a munka szerves folytatása volt Cambridge-ben elkezdett kutatásainak. Ha ma egy magreakció gerjesztési függvényéről beszélünk, akkor olyan kísérleti berendezésre gondolunk, amelynek fő alkotóeleme egy gyorsító, amellyel a reakciót kiváltó részecske energiáját folyamatosan tudjuk növelni.

Mínthogy gyorsítóépítésre 1938-ban Debrecenben még gondolni sem lehetett, Szalay Sándor egy „lassító berendezést” épített. Kihasználta egyrészt azt a tényt, hogy a radioaktív polónium  $\alpha$ -sugárzásának meglehetősen nagy az energiája  $E_\alpha = 5,3$  MeV, másrészt azt a jelenséget, hogy az  $\alpha$ -részecskék energiája gázon való áthaladás során csökken. A gáznyomás növelésével tehát az  $\alpha$ -részecskék energiája folyamatosan csökkenthető. Ezt a szellemes módszert használva mérte meg számos mag gerjesztési függvényét [6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15] és ezzel megvetette a magyar kísérleti magfizika alapjait.

Az elmúlt 40 év alatt Szalay Sándor a magfizika számos fejezetére terjesztette ki kutatásait. Jelentős eredményeket ért el a radioaktivitás tanulmányozása [17, 19, 26, 35, 46, 48], a magspektroszkópia [24, 47, 54, 56, 58, 70, 93, 95], a magreakciók vizsgálata [66, 78, 81, 82, 85, 96], és az atomenergia hasznosításával kapcsolatos kutatások [51, 57] terén.

Ezeknek a kutatásoknak az értékét nagyban fokozza az a körülmény, hogy szinte kivétel nélkül egy-egy új kísérleti módszer vagy kísérleti berendezés kidolgozásával párosultak, amelyek ma az Atommag Kutató Intézetben egy széles spektrumú természettudományos kutatás anyagi alapját képezik.

Szalay Sándor több mint három évtizeden át tanította a magfizikát a Kossuth Lajos Tudományegyetem Kísérleti Fizikai Intézetében. Abban a megtiszteltetésben van részem, hogy ezt a munkát már tíz éve én folytathatom.

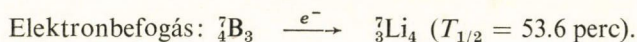
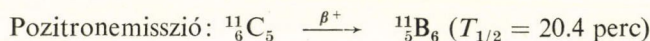
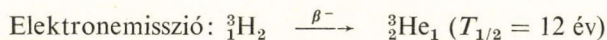


Az elmúlt évek tapasztalata azt mutatja, hogy az előadások élményszerűségét és ezen keresztül hatékonyságát jelentős mértékben fokozza az a tény, hogy a magfizika számos fejezetének jelenségeit és módszereit Szalay munkáival lehet illesztrálni.

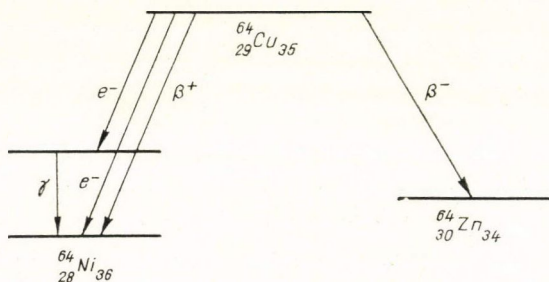
Szalay Sándor 70-ik születésnapját én azzal szeretném ünnepelni, hogy bemutatok egy fejezetet egy készülő magfizika tankönyvből, amelyből kiviláglik, hogy tudományos eredményei a következő nemzedék tananyagába épülnek be.

### Béta-bomlás

A radioaktivitás jelenségét a múlt század végén fedezte fel Becquerel (1896). Csakhamar kitűnt, hogy a radioaktivitás három különböző jelenséggé foglal magába: az  $\alpha$ -,  $\beta$ - és  $\gamma$ -aktivitást. Később kiderült az is, hogy a  $\beta$ -aktivitás ugyan-csak különböző megjelenési formákat ölthet, nevezetesen három típust különböztethetünk meg, 1. az elektronemissziót, 2. a pozitronemissziót, és 3. az elektronbefogást. A három esetre egy-egy példát mutatunk be.



Természetesen vannak olyan esetek, ahol egynél több fajta bomlás is előfordul, sőt a  ${}^{64}\text{Cu}$  például mind a három bomlásra képes:



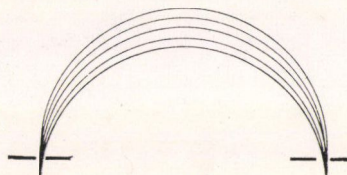
1. ábra

Milyen mérhető mennyiségekkel lehet jellemezni a béta-bomlást? Az első és legfontosabb fizikai mennyiség, amelyet a béta-bomlás kapcsán mérhetünk: a kibocsátott részecskék energia szerinti eloszlása. Ennek a meghatározására elvben több módszer is létezik, a leggyakrabban használt eljárás azonban a mágneses spektrométer alkalmazása. A mágneses spektrométerben a töltött részecske, egy homogén mágneses térben mozogva körpályára kényszerül és a pálya sugarából a részecske energiája meghatározható. A mágneses spektrométereket, mint általában a spektrométereket, két mennyiség jellemzi. Az egyik a spektrométer felbontóképessége, a másik a spektrométer hatásfoka vagy fényereje. A felbontóképesség

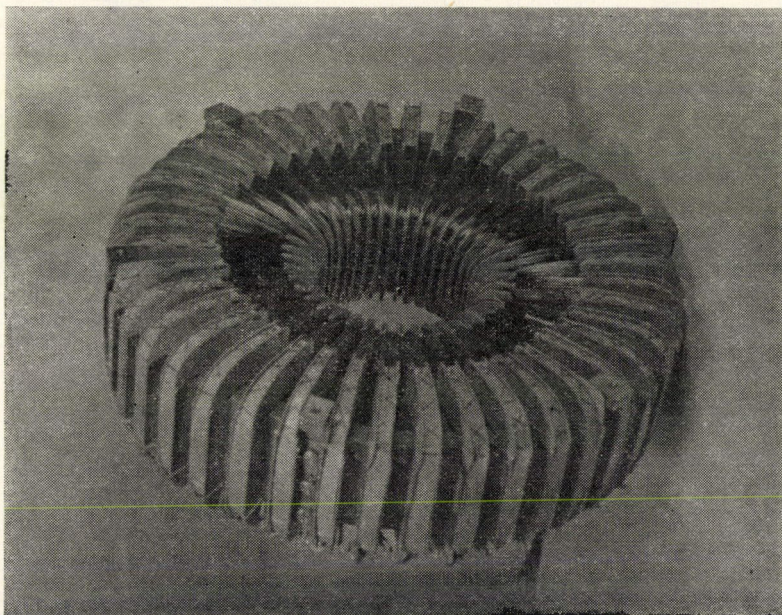


egy dimenziótlan szám:  $\Delta E/E$ , ahol  $\Delta E$  az az  $E$  energia körüli intervallum, amelyen belül a részecskéket a berendezés energia szerint már nem tudja megkülönböztetni.

A hatásfok azt adja meg, hogy a spektrométerbe belépő részecskék hány százalékát tudjuk detektálni. Minden spektrométer esetén ez a két jellemző szám kompromisszum eredményeként áll elő, mert általában minél nagyobb a felbontóképesség, annál kisebb a hatásfok. Megfordítva, általában a hatásfokot a felbontóképesség lerontása árán lehet fokozni. Van azonban lehetőség a hatásfok növelésére úgy is, hogy közben a felbontóképesség nem feltétlenül romlik. Az egyik ilyen lehetőség az ún. irányfókuszálás. Az elvet könnyen lehet demonstrálni, ha adott sugarú köröket rajzolunk egymáshoz képest eltolt középponttal. Ekkor, amint azt a közvetlen szemlélet mutatja (2. ábra), lehetséges úgy megválasztani a részecskék mozgását határoló diafragmákat (a forrás után és a detektor előtt), hogy az adott sugarú pályán, de különböző irányba tartó részecskék is beérkezzenek a detektorba. Ennek a módszernek a lényege tehát a geometria ügyes megválasztása. Egy hasonló hatásfoknövelő spektrométer, amely azonban már jelentős technikai erőfeszítést is igényel, az úgynevezett toroid típusú béta-spektrométer, amelynek megalkotása Szalay Sándor, Berényi Dénes és Horváth János nevéhez fűződik. A toroid típusú spektrométer a közönséges spektrométernek több példányban való megismétlését jelenti. Az egyes spektrométereket azonban egy narancs gerezdjeihez hasonlóan helyezzük el. Így módon lehetséges, hogy az egyes spektrométereknek a forrása is



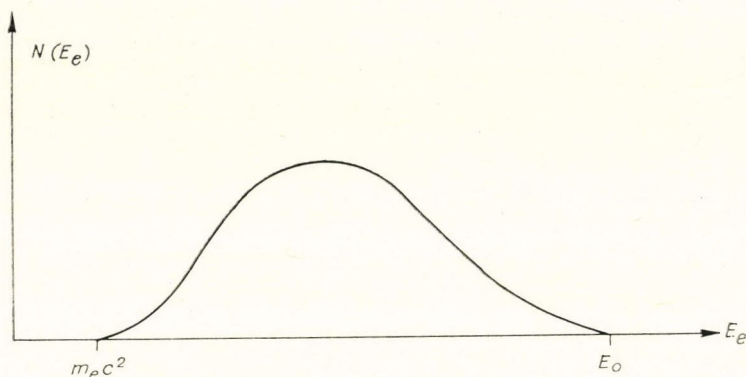
2. ábra



3. ábra

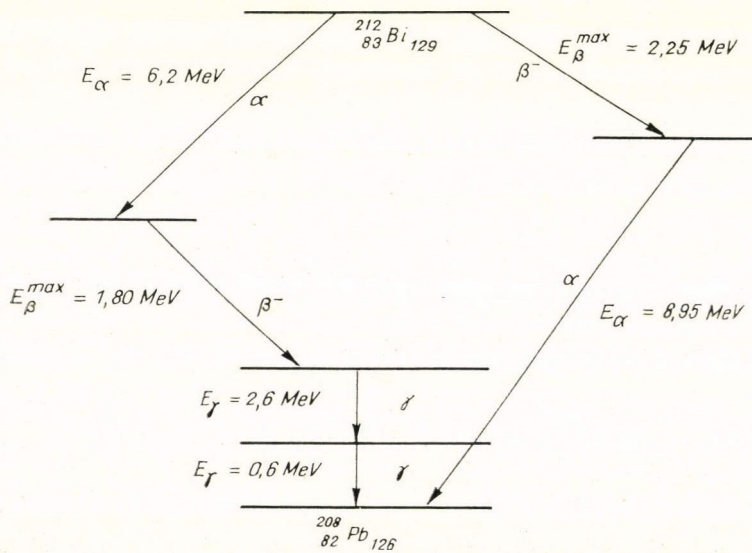


és a detektora is közös legyen. A közös forrás és detektor a rendszer szimmetria-tengelyében helyezkedik el. (3. ábra) Az ilyen toroid alakú spektrométert egyetlen, szegmensekre osztott gerjesztő tekercssel lehet megépíteni, arra ügyelve, hogy az egyes szektorokban uralkodó mágneses tér azonos legyen. Ha ezt sikerült elérni, akkor a fényerő annyiszorososan növekszik meg a felbontóképesség lényeges romlása nélkül, ahány szektorból áll a spektrométer.



4. ábra

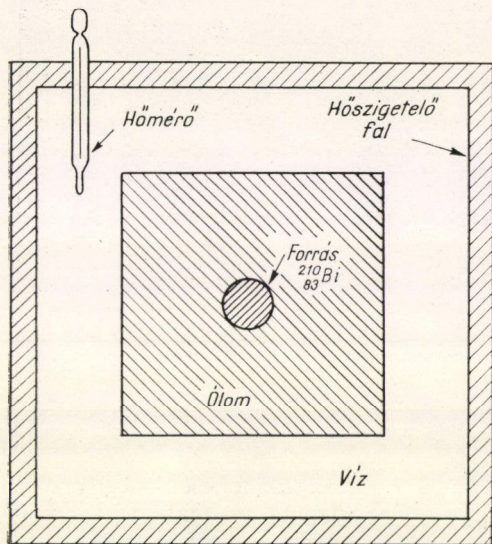
A mágneses spektrométer segítségével megállapítható az emittált elektronok energiaspektruma. A 4. ábrán egy ilyen spektrumot mutatunk be. Amint látjuk a részecskék energia szerinti eloszlása folytonos görbe. Ez teljesen meglepő, ha meggondoljuk, hogy a magoknak diszkrét energiaállapotai vannak, tehát mind a bomlás előtti mind pedig a bomlás utáni mag jól meghatározott energiával ren-



5. ábra



delkezik, következésképp a kibocsátott részecske energiájának is diszkrétnek kellene lenni. Ha megvizsgáljuk a  $^{212}\text{Bi}$  mag bomlását, akkor ez a probléma még élesebben rajzolódik ki. A  $^{212}\text{Bi}$  bomlási módjait bemutató ábráról (5. ábra) leolvasható, hogy a két irányba elágazó folyamat során a részecskék által elvitt energia összege a két ágra ugyanaz. Itt azonban feltételeztük, hogy a  $\beta$ -részecskék energiáját a folytonos spektrumban előforduló maximális energiával azonosíthatjuk. Innen úgy tűnik, hogy a  $\beta$ -sugárzás kibocsátása során a  $\beta$ -részecskék nem viszik el a rendelkezésre álló össz-energiát.



6. ábra

Kérdés: hová lesz a hiányzó energia? Ennek a kérdésnek a megválaszolására különböző feltevésekkel éltek. Az egyik az volt, hogy talán lágy gamma-sugárzás viszi el a hiányzó energiát. A másik feltevés szerint az elektron energiavesztését szenved az atomból való eltávozása során. A kérdés eldöntésére 1927-ben Ellis és Wooster a  $^{210}\text{Bi}$  mag bomlását egy kaloriméter (6. ábra) segítségével vizsgálta meg. A kaloriméterben elhelyezett nagy ólomtömb középpontjába tették a  $\beta$ -forrást. Minthogy az ólomtömbből sem a  $\beta$ -részecskék, sem a feltételezett  $\gamma$ -részecskék nem távozhattak, az ólomtömbben elnyelt energiának, osztva a bomlások számával, meg kellene egyeznie a maximális energiával.

Megmérték az ólomtömb hőmérséklet-emelkedését, ebből visszakövetkeztettek az egy bomlási aktusban felszabadult energiára és eredményül azt kapták, hogy

$$\text{Energia/bomlások száma} = 0.33 \text{ MeV,}$$

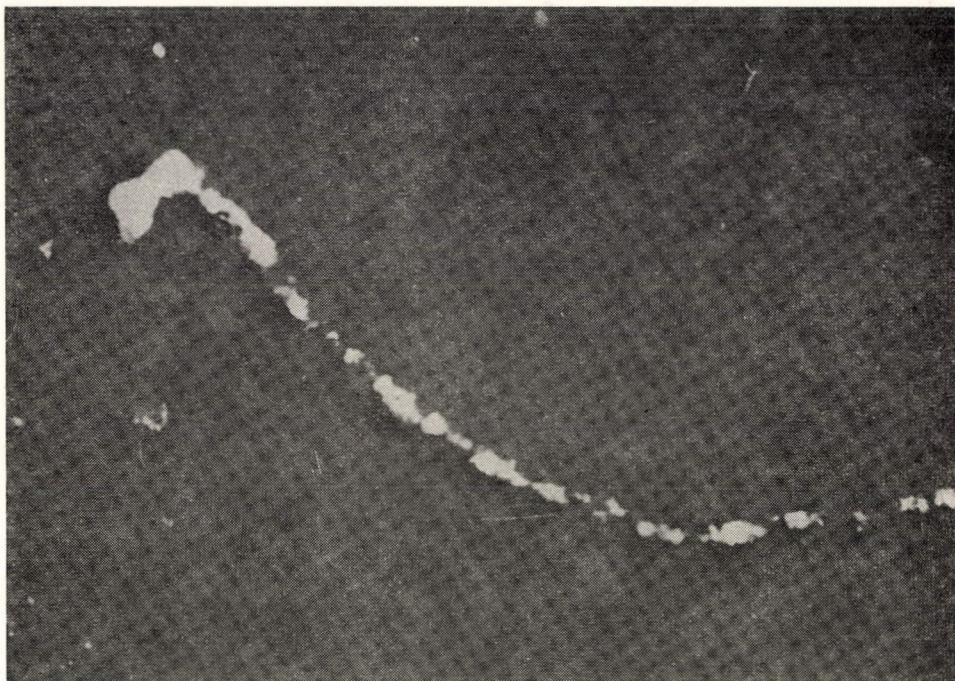
holott a maximális energia  $E_e^{\max} = 1,2 \text{ MeV}$ .

Ez a helyzet Niels Bohrt arra az elkészedett gondolatra vezette, hogy esetleg az energia-megmaradás törvénye érvényét veszti. A béta-bomlás nemcsak az energia-megmaradás törvényének látszik ellentmondani, hanem az impulzusmomentum-megmaradás törvényének is. Ha ugyanis a bomlás során egy feles spinű ( $\hbar/2$ ) elektron távozik a magból, akkor a visszamaradó mag impulzusmomentumának szükségképpen feles értékkel kellene változnia. Ha a kibocsátó mag fermion volt, akkor a visszamaradó mának bozonnak kellene lennie és megfordítva. Ez a várackozás azonban a tapasztalat szerint téves. A béta-bomlás során az impulzusmomentum-változás  $\hbar$  egész számú többszöröse. A leglátványosabb „ellentmondás” az alapvető fizikai törvények és a béta-bomlás jelensége között abból a kísérletből tűnik ki, melyet Szalay Sándor és Csikai Gyula végeztek el 1956-ban. A  $^6\text{He}$  mag bomlását vizsgálták, amelynek 0,81 perc a felezési ideje és a kibocsátott részecske maximális energiája 3,5 MeV. A  $^6\text{He}$  bomlását egy ködkamra gázterében figyelték meg. A



sztereográfikus fényképfelvételeken látható, hogy a mágneses térben mozgó elektron körpályára kényszerül. A kibocsátás helyéről egy másik rövid nyom is kiindul, ez a visszalökődött  ${}^6\text{Li}$  nyoma.

A 7. ábra alapján megállapítható, hogy az impulzus-megmaradás törvénye is veszélybe került: a bomlás előtt a  ${}^6\text{He}$  mag csupán termikus mozgást végzett, tehát



7. ábra. Béta-bomlás ködkamrában. Az elektron és a visszalökött mag nyoma látható.  
A neutrínó kilépésére az utal, hogy a nyomok nem  $180^\circ$ -os szöget zárnak be

az impulzusa gyakorlatilag zérus volt; a bomlás után keletkezett termékek össz-impulzusa:  $\vec{p}_e + \vec{p}_{\text{Li}}$  viszont szemmel láthatóan különbözik zérustól. Az energia-, az impulzus- és az impulzusmomentum-megmaradás törvényét oly módon lehet „megmenteni”, ha elfogadjuk Paulinak azt az 1931-ben megfogalmazott feltevését, amely szerint a béta-bomlás során az elektronnal együtt egy elektromosan semleges, feles spinű, 0-tömegű részecske is távozik a magból. Ezt a részecskét antineutrínónak nevezzük. Létezését feltételezve Fermi kiszámította a mag által kibocsátott elektronok energiaspektrumát, figyelembe véve, hogy az elektron mellett egy antineutrínó is távozik a magból. Az időegységre eső bomlási valószínűséget a perturbációszámítás ismert képlete alapján határozhatjuk meg:

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Phi_V | H_\beta | \Phi_K \rangle|^2 \varrho.$$



Itt  $\varrho$  a bomlás után előálló végállapotok sűrűsége,  $H_\beta$  a bomlásért felelős kölcsönhatás Hamilton-operátora,  $\Phi_K$  és  $\Phi_V$  a kezdő, illetve végállapot állapotvektorai. Koncentráljuk figyelmünket először a végállapot sűrűségének meghatározására. Az átmeneti valószínűség képletében szereplő átmeneti mátrixelemmel, az átmenetet előidéző kölcsönhatási operátor szerkezetével és fizikai jelentésével majd a későbbiek folyamán fogunk foglalkozni. A  $\varrho$  állapotok sűrűség meghatározásához vezető gondolatmenet a következő. Ha az elektron impulzusa a  $(\vec{p}_e, \vec{p}_e + d\vec{p}_e)$  intervallumba, az antineutrínó impulzusa pedig a  $(\vec{p}_{\bar{\nu}}, \vec{p}_{\bar{\nu}} + d\vec{p}_{\bar{\nu}})$  intervallumba esik, akkor a két részecske állapotát jelképező fázispont a fázis térben a

$$V p_e^2 dp_e d\Omega_e, \text{ illetve a } V p_{\bar{\nu}}^2 dp_{\bar{\nu}} d\Omega_{\bar{\nu}}$$

térfogatelemben lesz található, ahol  $V$  a közönséges térbeli térfogat. A lehetséges állapotok száma a Fermi-statisztika szerint:

$$dn_e = \frac{V p_e^2 dp_e d\Omega_e}{(2\pi\hbar)^3}, \text{ illetve } dn_{\bar{\nu}} = \frac{V p_{\bar{\nu}}^2 dp_{\bar{\nu}} d\Omega_{\bar{\nu}}}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Tételezzük fel, hogy az antineutrínó energiája és impulzusa között ugyanaz az összefüggés érvényes, mint az elektron esetén:

$$E_e^2 = m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2, \quad E_e dE_e = c^2 p_e dp_e;$$

$$E_{\bar{\nu}}^2 = m_{\bar{\nu}}^2 c^4 + p_{\bar{\nu}}^2 c^2, \quad E_{\bar{\nu}} dE_{\bar{\nu}} = c^2 p_{\bar{\nu}} dp_{\bar{\nu}}.$$

Innen adódik, hogy

$$dn_e = \frac{V E_e \sqrt{E_e^2 - m_e^2 c^4}}{(2\pi\hbar)^3 c^3} dE_e d\Omega_e, \quad dn_{\bar{\nu}} = \frac{V E_{\bar{\nu}} \sqrt{E_{\bar{\nu}}^2 - m_{\bar{\nu}}^2 c^4}}{(2\pi\hbar)^3 c^3} dE_{\bar{\nu}} d\Omega_{\bar{\nu}}.$$

Figyelembe véve, hogy az elektron és az antineutrínó egy adott energián „osztozik”, azaz hogy

$$E_e + E_{\bar{\nu}} = E_0,$$

eredményül azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \varrho &= \frac{dn_e dn_{\bar{\nu}}}{dE_{\bar{\nu}}} = \\ &= \frac{(4\pi)^2 V^2}{(2\pi\hbar)^6 c^6} E_e (E_0 - E_e) \sqrt{E_e^2 - m_e^2 c^4} \sqrt{(E_0 - E_e)^2 - m_{\bar{\nu}}^2 c^4} dE_e. \end{aligned}$$

Az átmeneti mátrixelemről tegyük fel, hogy az elektron energiájától független konstans. Ebben az esetben a bomlási valószínűségnek az  $E_e$  energia szerinti differenciáhányadosa

$$\frac{dw}{dE_e} = K E_e (E_0 - E_e) \sqrt{E_e^2 - m_e^2 c^4} \sqrt{(E_0 - E_e)^2 - m_{\bar{\nu}}^2 c^4},$$

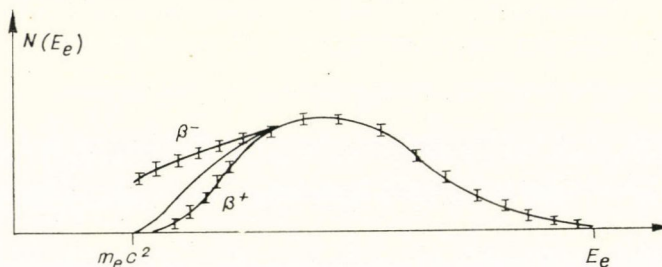
ahol a  $K$  konstans tényezőt a

$$K = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{(4\pi)^2 V^2}{(2\pi\hbar)^6 c^6} |\langle \Phi_V | H_\beta | \Phi_K \rangle|^2$$



képlet definiálja. A  $\frac{dw}{dE_e}$  mennyiség épp az elektronok energia szerinti eloszlását adja. Ha tehát feltevéseink helyesek, akkor ennek a függvénynek reprodukálnia kell a kísérletileg mérhető  $N(E_e)$  energiaspektrumot.

A 8. ábrán a számított elektronspektrumot látjuk, amely fő vonásaiban kitűnően visszadja a mért spektrum alakját. Említésre méltó eltérés a spektrum kis



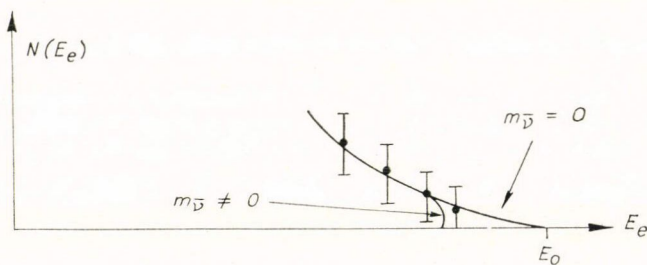
8. ábra

energiájú részén tapasztalható. Elektron- illetve pozitronbomlás esetén az eltérés ellentétes irányú (lásd a 8. ábrát). Ebből nyomban világos, hogy az eltérés oka a kibocsátott részecske töltésével kapcsolatos. Valóban, ha figyelembe vesszük a mag Coulomb-terének gyorsító hatását a kibocsátott pozitronra, illetve lassító hatását az elektronra, ami természetesen annál jelentősebb, mennél kisebb a részecske energiája, a kísérleti adatok és a számított spektrum közötti eltérés megszűnik. A Coulomb-tér hatását egy  $F^\pm(Z, E_e)$  alakú korrekciós tényezővel juttathatjuk kifejezésre, ami természetesen függ a kibocsátó mag  $Z$  rendszámától. Az energiaspektrum nagyenergiájú tartományát vizsgálva érdemes feltenni azt a kérdést, hogy az  $E_0$  energia közelében a spektrum érintője vízszintes-e vagy függőleges. Ennek eldöntésére vizsgáljuk meg a

$$\left[ \frac{d}{dE_e} \left( \frac{dw}{dE_e} \right) \right]_{E_e=E_0-m_{\bar{\nu}}c^2}$$

mennyiséget. (9. ábra)

Könnyen belátható, hogy ez végtelen, az érintő tehát függőleges. Ha azonban feltezzük, hogy az antineutrino tömege zérus, akkor a derivált értéke zérus. Ebből világos, hogy az antineutrino tömegére annál pontosabb felső korlátot tudunk adni,



9. ábra

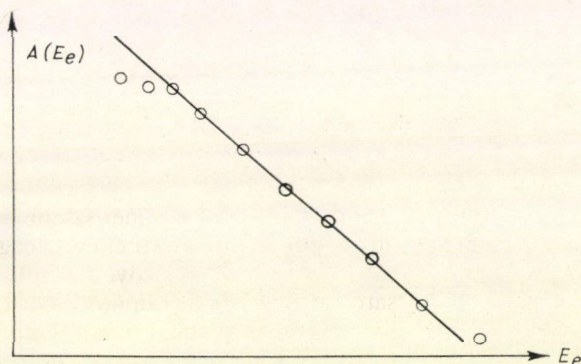
minél pontosabban tudjuk mérni a spektrum végén az érintő meredekségét. A legpontosabb korlátot a  $^3\text{H}_2$  spektrumának mérésével lehetett megállapítani, mivel itt a bomlási energia rendkívül alacsony, az eredmény:

$$m_{\bar{\nu}}c^2 \leq 200 \text{ eV}.$$

A kísérlet és az elmélet könnyebb grafikus összehasonlítása érdekében Kurie az

$$A(E_e) = \frac{N(E_e)}{F^\pm(Z, E_e) \sqrt{E_e^2 - m_e^2 c^4} (E_0 - E_e)^2}$$

menyiséget ábrázolta az  $E_e$  függvényében, ahol  $N(E_e)$  a megfigyelt részecskék száma. Könnyű belátni, hogy ha a kísérlet és az elmélet összhangban van, akkor egy egyenest kell kapnunk (10. ábra). Itt és a továbbiakban feltételezzük, hogy az  $m_{\bar{\nu}}$  anti-neutrino-tömeg zérus. A Kurie-diagram valóban egyenesnek adódott igen sok mag esetén. Tapasztaltak azonban olyan eseteket is, amikor az egyenestől markánsan



10. ábra

eltérő görbe adódott. Csakhamar kitűnt, hogy azoknak a magoknak, amelyeknek a Kurie-diagramja eltér az egyenestől, a bomlási sebessége is kisebb. Megjegyzendő, hogy a bomlási sebességek összehasonlítására a  $t$  átlagos élettartam nem alkalmas, minthogy ez erősen függ a bomlás során felszabaduló  $E_0$  energiától:

$$t^{-1} = \int dw = \int K E_e \sqrt{E_e^2 - m_e^2 c^4} (E_0 - E_e)^2 F^\pm(Z, E_e) dE_e.$$

Ehelyett be kell vezetni az ún.  $ft$  értéket, ahol  $t$  az átlagélettartamot jelöli,  $f$ -et pedig az

$$f(Z, E_0) = \int_{m_e c^2}^{E_0} E_e \sqrt{E_e^2 - m_e^2 c^4} (E_0 - E_e)^2 F^\pm(Z, E_e) dE_e$$

képlet definiálja. Innen látható, hogy ha  $K$  valóban konstans, akkor  $ft = K^{-1}$ .

Az  $ft$  érték szerint a bétabomló magok jól elkülöníthető csoportokra oszlanak. Az ugyanazon csoporthoz tartozó magok Kurie-diagramja hasonló jellegű, a különböző csoportokhoz tartozóké határozottan különböző.



A legkisebb  $ft$  értékkel jellemzett csoporthoz tartozó magok bomlását megengedett bomlásnak nevezzük, a többi csoportokhoz tartozókat tiltottnak. Az  $ft$  érték növekedési sorrendjében beszélünk elsőrendben, másodrendben, sit tiltott bomlásról. Mi az oka a tiltottságnak? Melyik elméleti feltevésünket kell módosítani ahhoz, hogy számot adhassunk a tiltott bomlásokról is?

Ahhoz, hogy ezekre a kérdésekre felelhessünk, meg kell vizsgálni az impulzusmomentum-viszonyokat. Minthogy az elektron is és az antineutrino is feles spinű, két eset lehetséges, az elektron-antineutrino eredő spinje vagy  $S=0$ , vagy  $S=1$ .

Az első esetben Fermi-féle, a második esetben Gamow—Teller-féle bomlásról beszélünk. Ha a mag bomlás előtti és bomlás utáni állapotának impulzusmomentuma azonos, akkor a Fermi-féle bomlás lehetséges. Ha a két impulzusmomentum legfeljebb eggyel különbözik, akkor a Gamow—Teller-bomlás következhet be. De mi történik akkor, ha a két impulzusmomentum különbsége több mint egy? Ebben az esetben az impulzusmomentum-megmaradás törvénye csak úgy teljesedhet, ha az elektron-neutrino pár  $L$  pálya-impulzusmomentumot is visz magával:

$$\vec{J}_K = \vec{J}_V + \vec{S} + \vec{L}$$

ahol

$$\vec{S} = \vec{S}_e + \vec{S}_{\bar{\nu}} \quad \text{és} \quad \vec{L} = \vec{L}_e + \vec{L}_{\bar{\nu}}.$$

$\vec{J}_K$  és  $\vec{J}_V$  a mag spinje a kezdeti és a végállapotban. A következőkben meg fogunk győződni arról, hogy a bomlási valószínűség annál kisebb és ezzel egyidejűleg az energiaspektrum annál jobban torzul, mennél nagyobb pálya-impulzusmomentumot visz magával az elektron-neutrino pár. Ez annyit jelent, hogy a tiltottság mértékét az elvitt pálya-impulzusmomentum határozza meg:

$L=0$ : megengedett bomlás

$L=1$ : elsőrendben tiltott bomlás

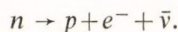
$L=2$ : másodrendben tiltott bomlás

s. i. t.

Az a felvetés, hogy az átmeneti valószínűségben szereplő  $\langle \Phi_V | H_\beta | \Phi_K \rangle$  átmeneti mátrixelem energiától független konstans, már eleve drasztikusan erős feltételezésnek tűnt, mint majd látni fogjuk, az eddig bevezetett elméleti feltevéseink közül ezt kell módosítanunk. Azt a tényt, hogy a Fermi-féle elméletet először nem a tiltott bomlásokkal hasonlították össze, olyan fizikátörténeti „szerencsének” tekinthetjük, ami lényegesen meggyorsította a fizika fejlődését.

A  $\beta$ -bomlás során egy részecske megszűnik létezni és helyébe más részecskék jönnek létre. Minthogy a kvantummechanikában a részecske megtalálási valószínűsége megmaradó mennyiség, a kvantummechanika eredeti formájában alkalmatlan a részecskék eltűnésének és keletkezésének leírására. A részecskék kvantumtérelmélete az a diszciplína, amelyben az alapvető mennyiségek éppen a részecskéltűntető és -eltűntető operátorok. Ezért a kvantumtérelmélet eszközeit kell igénybe vennünk. Mielőtt erre rátérnénk, célszerű további megfigyelések eredményeivel megismerkedni.

Megfigyelték, hogy nemcsak az atommagok képesek  $\beta$ -bomlásra, hanem a szabad neutron is:





A neutron felezési ideje  $T=11,7\pm 0,3$  perc. A neutron és a proton tömegéből kiszámíthatjuk a  $\beta$ -bomlás során felszabaduló energiát:

$$m_n c^2 - m_p c^2 = Q_\beta \quad (=1,29 \text{ MeV}).$$

A felszabaduló  $Q_\beta$  energia fedezi az antineutrino teljes energiáját, valamint az elektron nyugalmi és kinetikus energiáját:

$$Q_\beta = E_{\bar{\nu}} + \sqrt{m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2}.$$

A szabad neutron bomlásának a megfigyelése feljogosít bennünket arra a feltételezésre, hogy az atommagok  $\beta^-$ -bomlása során is a mag egyetlen neutronja alakul át protonná. Ezt általánosítva azt is feltételezhetjük, hogy a  $\beta^+$ -bomlás, illetve az elektronbefogás során is a mag egyetlen protonja alakul át neutronná. A szabad proton csak azért nem bomlik neutronra, mert ezt az energia-megmaradás tiltja. Ha azonban elegendően nagy energiájú antineutrinnal bombázzuk a protont, akkor az antineutrino abszorbeálódhat és ekkor már végbemehet a

$$p + \bar{\nu} \rightarrow n + e^+$$

átalakulás.

Ennek a reakciónak rendkívül kicsi a hatáskeresztmetszete ( $\sigma(p + \bar{\nu} \rightarrow n + e^+) \sim 10^{-43} \text{ cm}^2$ ) ennek ellenére Reines és Cowan képes volt megfigyelni ezt a folyamatot egy igen szellemes felépítésű kísérleti berendezéssel. A kísérlethez szükséges intenzív antineutrino-fluxust egy nagy teljesítményű reaktor szolgáltatta. A reaktor fűtőelemeiben ugyanis nagy mennyiségű hasadási termék halmozódik fel. A legtöbb hasadási termék nagy neutronfelesleggel rendelkezik és emiatt elektronkibocsátással bomlik, miközben antineutrínót emittál. A kísérleti feladat az, hogy az antineutrínó indukálta átalakulás végtermékeit, a neutront és a pozitront észleljük. Minthogy a reakció hatáskeresztmetszete nagyon kicsi, azért a várható neutronok és pozitronok száma még akkor is igen kicsi lesz, ha egy fürdőkád méretű céltárgyat használunk. Ráadásul egy ilyen nagy méretű céltárgy belsejéből sem a neutron, sem a pozitron nem tud kijutni. Ezt a nehézséget a következő módon lehetett áthidalni. Egy  $(132 \times 183 \times 56) \text{ cm}^3$  méretű edénybe hidrogéntartalmú szcintilláló folyadékot öntöttek (trietil benzent). A keletkező pozitron a folyadékban nagyon rövid idő alatt ( $\sim 10^{-14} \text{ sec}$ ) lelassul, majd egy elektronnal ütközvén szétsugárzódik. A szétsugárzás az esetek túlnyomó többségében úgy történik, hogy két ( $m_e c^2 = 0,51 \text{ MeV}$ ) energiájú és ellentétes impulzusú  $\gamma$ -részecske keletkezik. Ezek a szcintillátor folyadékban fényfelvillanást hoznak létre. A folyadékban a neutron is lelassul, de a lelassulási idő lényegesen hosszabb ( $30 \cdot 10^{-6} \text{ sec}$ ), mint a pozitron esetén. Ezt a tényt hasznosítani lehet oly módon, hogy a folyadékhoz egy kevés  $\text{CdCl}_2$ -ot adunk. A  $^{114}\text{Cd}$  neutronbefogási hatáskeresztmetszete lassú neutronok esetén rendkívül nagy, ezért a lelassult neutron nagy valószínűséggel egy kadmium-mag abszorbeálja. A neutronbefogás eredményeként a keletkező mag mintegy 9,1 MeV energiára gerjesztődik. Ezt a fölös energiát gyors egymásutánban kibocsátott  $\gamma$ -részecskék viszik el, amelyek a folyadékot szcintillációra kényszerítik. Ez utóbbi fényfelvillanások azonban a neutron lelassulási idejének megfelelően később jelentkeznek. Ha tehát a szcintillátort fotoelektronsokszorozókkal vesszük körül, akkor késleltetett-koincidenca-kapcsolással kiválogathatjuk azokat az eseményeket, amelyek két, egymáshoz képest  $30 \cdot 10^{-6}$  másodperccel késő fényfelvillanásnak felelnek meg.



Ez a kísérlet ugyan sokkal áttételesebben és kevésbé szembetűnő módon mutatja az antineutrino hatását, mint a Szalay—Csikai-féle ködkamra kísérlet, elvi szempontból azonban mégis ezt kell az antineutrino létezését direkt módon bizonyító kísérletnek tekinteni.

### Feles spinű részecsketerek kvantálása

A gyenge kölcsönhatás általános törvényeinek a tárgyalása előtt szükséges megismerkednünk a feles spinű részecskék leírására szolgáló térelméleti módszerekkel. Az elektront, a neutrínót és a nukleont egy-egy tér kvantumának fogjuk tekinteni ugyanúgy, mint ahogy a foton az elektromágneses tér kvantuma. Az adott feles spinű részecskéhez rendelt teret a  $\psi(x)$  térmennyiséggel írjuk le, amely a Dirac-egyenletnek tesz eleget:

$$(\gamma_\mu \partial_\mu + M)\psi(x) = 0,$$

ahol  $M = mc/\hbar$  és  $m$  a részecske tömegét jelöli. A  $c=1$ ,  $\hbar=1$  egységrendszer használva  $M=m$ . A  $\gamma_\mu$  mátrixok eleget tesznek a

$$\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}$$

felcserélési relációknak. A Dirac-egyenlet ebben a térelméleti felfogásban ugyanúgy klasszikus téregyenlet, mint amilyen téregyenlet a klasszikus Maxwell-egyenlet. Ahogyan a klasszikus Maxwell-egyenletet kvantálnunk kell ahhoz, hogy a kvantált elektromágneses jelenségeket leírjuk, ugyanúgy a klasszikus Dirac-teret is kvantálni fogjuk. Ennek a kvantált térnek a kvantumai lesznek azután a feles spinű részecskék. A tér kvantálását oly módon hajtjuk végre, hogy a  $\psi(x)$  térmennyiség, illetve  $\psi^+(x)$  adjungáltja között felcserélési törvényeket szabunk ki. Nevezetesen megköveteljük, hogy a négykomponensű  $\psi(x)$  és  $\psi^+(x)$  komponenseire teljesedjenek a következő relációk:

$$\{\psi_\alpha(\vec{r}), \psi_\beta^+(\vec{r}')\} = \delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{r} - \vec{r}'),$$

$$\{\psi_\alpha(\vec{r}), \psi_\beta(\vec{r}')\} = 0, \quad \{\psi_\alpha^+(\vec{r}), \psi_\beta^+(\vec{r}')\} = 0.$$

Az itt előforduló függvények mind ugyanazon időpontban értendők. A  $\psi(x)$  és  $\psi^+(x)$  térmennyiségek segítségével a tér energiája, impulzusa, impulzusmomentuma, töltése, tömege, stb. mind kifejezhető:

$$\text{a tér teljes energiája: } H = \int \psi^+(x) \gamma_0 i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) dV,$$

$$\text{a tér teljes impulzusa: } \vec{P} = \int \psi^+(x) \gamma_0 i \vec{\nabla} \psi(x) dV,$$

stb. A felcserélési törvények következtében a  $\psi(x)$  és  $\psi^+(x)$  térmennyiségek szükségképpen operátorokká válnak, ezért a teret jellemző összes többi fizikai mennyiség is operátor jellegűt ölt. Foglalkozzunk először a  $\psi(x)$  térmennyiségek előállításával. Tételezzük fel, hogy egy olyan  $V$  térfogat belsejében kívánjuk leírni a fizikai történetet, amely  $V$  térfogat felületén a határfeltételek periodikusak és tegyük fel az egyszerűség



kedvéért, hogy ez a térfogat kocka alakú. Ebben az esetben a Dirac-egyenlet megoldását síkhullámok segítségével állíthatjuk elő a következő formában:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_p \sum_{s=1}^2 [A_s(\vec{p}) u_s(\vec{p}) e^{ipx} + B_s^+(\vec{p}) v_s(-\vec{p}) e^{-ipx}]$$

$$\psi^+(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_p \sum_{s=1}^2 [A_s^+(\vec{p}) u_s^+(\vec{p}) e^{-ipx} + B_s(\vec{p}) v_s^+(-\vec{p}) e^{ipx}].$$

Behelyettesítve a Dirac-egyenletbe azt találjuk, hogy az itt szereplő  $u_s(\vec{p})$  és  $v_s(-\vec{p})$  spinoroknak eleget kell tenniük az

$$(ip_\mu \gamma_\mu + m) u_s(\vec{p}) = 0 \quad \text{és}$$

$$(-ip_\mu \gamma_\mu + m) v_s(-\vec{p}) = 0$$

egyenleteknek. Ezen felül kiszabjuk a

$$\sum_{r=0}^3 u_s^r(\vec{p}) u_{s'}^r(\vec{p})^* = \delta_{ss'} \quad \text{és}$$

$$\sum_{r=0}^3 v_s^r(-\vec{p}) v_{s'}^r(-\vec{p})^* = \delta_{ss'}$$

ortonormáltsági feltételeket. A  $\psi(x)$  és  $\psi^+(x)$ -re felírt felcserélési törvények csak akkor elégíthetők ki, ha az  $A_s(\vec{p})$ ,  $B_s(\vec{p})$  stb. mennyiségek az

$$\{A_s(\vec{p}), A_{s'}^+(\vec{p}')\} = \{B_s(\vec{p}), B_{s'}^+(\vec{p}')\} = \delta_{ss'} \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

$$\{A_s(\vec{p}), A_{s'}(\vec{p}')\} = \{B_s(\vec{p}), B_{s'}(\vec{p}')\} = 0$$

$$\{A_s(\vec{p}), B_{s'}(\vec{p}')\} = \{A_s^+(\vec{p}), B_{s'}^+(\vec{p}')\} = 0$$

felcserélési törvényeknek tesznek eleget.

Behelyettesítéssel könnyű belátni, hogy a tér energiaoperátora a

$$H = \sum_{\vec{p}, s} \varepsilon_s^{(+)}(\vec{p}) n_s^{(+)}(\vec{p}) + \sum_{\vec{p}, s} \varepsilon_s^{(-)}(\vec{p}) n_s^{(-)}(\vec{p}) - \sum_{\vec{p}, s} \varepsilon_s^{(-)}(\vec{p})$$

alakba írható. Itt az  $\varepsilon_s^{(+)}(\vec{p})$  és  $\varepsilon_s^{(-)}(\vec{p})$  a Dirac-egyenlet pozitív, illetve negatív frekvenciás megoldásaihoz tartozó energia-sajátértékek:

$$\varepsilon_s^{(\pm)}(\vec{p}) = \pm \omega_s^{(\pm)}(\vec{p}), \quad \text{ahol} \quad \omega_s^{(\pm)}(\vec{p}) = \pm \sqrt{\vec{p}^2 + m^2}.$$

Az  $n_s^{(+)}(\vec{p})$  és  $n_s^{(-)}(\vec{p})$  operátorokat az

$$n_s^{(+)}(\vec{p}) = A_s^+(\vec{p}) A_s(\vec{p})$$

és az

$$n_s^{(-)}(\vec{p}) = B_s^+(\vec{p}) B_s(\vec{p})$$

képletek definiálják. A felcserélési törvények alapján könnyű meggyőződni arról, hogy  $[n_s^{(\pm)}(\vec{p})]^2 = n_s^{(\pm)}(\vec{p})$ , ebből pedig következik, hogy  $n_s^{(\pm)}(\vec{p})$  sajátértéke csak 1 vagy 0 lehet.

Ha a tér  $|\Phi_0\rangle$  alapállapotát, azaz a vákuumállapotot, úgy definiáljuk, hogy

$$n_s^{(\pm)}(\vec{p}) |\Phi_0\rangle = 0$$



legyen, és megállapodunk abban, hogy a tér  $E$  energiáját a vákuumállapot

$$E_0 = \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle = - \sum_{\vec{p}, s} \varepsilon_s^{(-)}(\vec{p})$$

energiájához képest mérjük, azaz

$$E = H - E_0 = \sum_{\vec{p}, s} \varepsilon_s^{(+)}(\vec{p}) n_s^{(+)}(\vec{p}) + \sum_{\vec{p}, s} \varepsilon_s^{(-)}(\vec{p}) n_s^{(-)}(\vec{p}),$$

akkor az eddig bevezetett formalizmusnak a következő fizikai interpretáció adható. Az  $n_s^{(+)}(\vec{p})$  operátor részecskeszám-operátorként értelmezhető, amelynek sajátértéke azt adja meg, hogy az  $s$  spinindexszel, a  $\vec{p}$  impulzussal és az  $\varepsilon_s^{(+)}(\vec{p})$  energiával jellemzett egyrészecskeállapot be van-e töltve ( $n=1$ ), avagy üres ( $n=0$ ).

Az  $n_s^{(+)}(\vec{p})$  sajátértéke 1-nél nagyobb nem lehet: éppen ezáltal jut kifejezésre a fermionokra vonatkozó Pauli-féle kizárási elv. Hasonlóképpen az  $n_s^{(-)}(\vec{p})$  operátor az antirészecskék részecskeszám-operátorként értelmezhető. A vákuumállapotot, amint a definícióból leolvasható, az jellemzi, hogy az összes részecske- és az összes antirészecske-állapot üres. A felcserélési törvények alapján meggyőződhetünk arról, hogy ha  $|\Phi_E\rangle$  a rendszernek egy  $E$  energia-sajátértékkel jellemzett sajátállapota, akkor az

$$A_s^{+}(\vec{p})|\Phi_E\rangle, \quad \text{illetve a}$$

$$B_s^{+}(\vec{p})|\Phi_E\rangle \quad \text{állapotok}$$

(vagy azonosan eltűnnek, vagy) szintén energia-sajátállapotok az

$$E + \varepsilon_s^{(+)}(\vec{p}), \quad \text{illetve az}$$

$$E + \varepsilon_s^{(-)}(\vec{p}) \quad \text{sajátérték}$$

mellett. Ezt úgy értelmezhetjük, hogy az  $A_s^{+}(\vec{p})$ , illetve a  $B_s^{+}(\vec{p})$  operátorok hatására a részecskék, illetve antirészecskék száma eggyel növekszik. Ha a kérdéses állapot már be volt töltve, akkor természetesen a részecskeszám-növekedés lehetetlen, azaz az új állapotvektor azonosan zérus.

Hasonló módon az

$$A_s(\vec{p})|\Phi_E\rangle, \quad \text{illetve a}$$

$$B_s(\vec{p})|\Phi_E\rangle \quad \text{állapotok}$$

(vagy azonosan eltűnnek) vagy az  $E - \varepsilon_s^{(\pm)}(\vec{p})$  energia-sajátértékhez tartozó energia-sajátállapotok. Az elmondottakat röviden úgy fejezhetjük ki, hogy  $A_s^{+}(\vec{p})$  és  $B_s^{+}(\vec{p})$  részecskét, illetve antirészecskét keltő operátorok;  $A_s(\vec{p})$  és  $B_s(\vec{p})$  pedig részecskét, illetve antirészecskét eltüntető operátorok. A többi fizikai mennyiség az energiához hasonló alakban írható fel. Például a tér teljes impulzusának operátora a

$$\vec{P} = \sum_{\vec{p}, s} \vec{p} (n_s^{(+)}(\vec{p}) + n_s^{(-)}(\vec{p}))$$

alakra hozható. Az értelmezés kézenfekvő: a tér teljes impulzusa az egyes részecskék, illetve antirészecskék impulzusából adódik össze. Az összegzés az összes lehetséges egyrészecske-állapotra kiterjed, de zérustól különböző járulékot csak akkor kapunk, ha a szóban forgó állapot be van töltve, azaz, ha az  $n_s^{(\pm)}(\vec{p})$  részecskeszám-operátor sajátértéke zérustól különböző.



### A gyenge kölcsönhatás Hamilton-operátóra

Feladatunk a  $\beta$ -bomlás jelenségkörének leírására szolgáló  $H_\beta$  kölcsönhatási operátor megszerkesztése.

A  $H_\beta$  operátort „levezetni” természetesen lehetetlen. Az általános fizikai elvek nyújtanak ugyan segítséget, de a megszerkesztett operátor helyességét egyedül a tapasztalattal való összehasonlítás dönti el.

Induljunk ki a szabad neutron bomlásának elemzéséből:

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}.$$

Egy részecske eltűnt és három keletkezett. Ebből következik, hogy a  $H_\beta$  operátorban valamilyen módon elő kell fordulniuk a neutron-, a proton-, az elektron- és az anti-neutrino-tereket leíró  $\psi_n$ ,  $\psi_p$ ,  $\psi_e$  és  $\psi_{\bar{\nu}}$  téroperátoroknak. Ezek ugyanis részecske-keltő és eltűntető operátorokból épülnek fel és alkalmasak a neutron eltűnésének és a proton, az elektron, valamint az antineutrino keletkezésének a leírására. Kérdés azonban, hogy milyen formában épül fel ezekből a  $H_\beta$  operátor? Minthogy a kölcsönhatás Hamilton-operátornak a koordinátarendszer megválasztásától független invariáns skalárnak kell lennie, ezért a négy téroperátorból kell invariáns skalárt képeznünk. Könnyű belátni, hogy a spinor jellegű téroperátorokból képzett  $(\bar{\psi}_p \psi_n)$  és  $(\bar{\psi}_e \psi_{\bar{\nu}})$  kombinációk skalár sűrűségként viselkednek, ahol  $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma_0$ . A

$$H_\beta^{(s)} = - \frac{G}{\sqrt{2}} \int (\bar{\psi}_p(x) \psi_n(x)) (\bar{\psi}_e(x) \psi_{\bar{\nu}}(x)) dV$$

alakú kifejezés tehát egy energia dimenziójú invariáns skalár, ha  $G$ -t az ún. csatolási állandót,  $\text{erg} \cdot \text{cm}^3$  dimenziójúnak választjuk.

Ha megkísérelnénk e  $H_\beta^{(s)}$ -et azonosítani a  $H_\beta$  operátorral, akkor nyomban ellentmondásba kerülnénk a tapasztalattal, mert a  $(\bar{\psi}_e(x) \psi_{\bar{\nu}}(x))$  kifejezés csak zérus eredő spinű ( $S=0$ ) elektron-antineutrino pár keletkezéséről tud számot adni, holott a megfigyelések szerint előfordul Gamow—Teller típusú bomlás is, amikor az elektron-antineutrino pár párhuzamos spinnel keletkezik, azaz az eredő spin:  $S=1$ . Ezt a nehézséget azonban könnyű kiküszöbölni, ha figyelembe vesszük, hogy invariáns skalárt nemcsak úgy képezhetünk, hogy két skalárt szorzunk össze, hanem úgy is, hogy két jól meghatározott transzformációs tulajdonsággal rendelkező tenzorból képezünk nullad-rendű tenzort, azaz invariáns skalárt. Könnyű belátni, hogy a spinor jellegű téroperátorokból képezhető tenzorok (pontosabban tenzor sűrűségek) a következők:

$$S: (\bar{\psi}_p \psi_n), \text{ illetve } (\bar{\psi}_e \psi_{\bar{\nu}})$$

$$V: (\bar{\psi}_p \gamma_\mu \psi_n), \text{ illetve } (\bar{\psi}_e \gamma_\mu \psi_{\bar{\nu}})$$

$$T: \left( \bar{\psi}_p \frac{i}{2} (\gamma_\mu \gamma_e - \gamma_e \gamma_\mu) \psi_n \right), \text{ illetve } \left( \bar{\psi}_e \frac{i}{2} (\gamma_\mu \gamma_e - \gamma_e \gamma_\mu) \psi_{\bar{\nu}} \right)$$

$$A: (\bar{\psi}_p \gamma_5 \gamma_\mu \psi_n), \text{ illetve } (\bar{\psi}_e \gamma_5 \gamma_\mu \psi_{\bar{\nu}})$$

$$P: (\bar{\psi}_p \gamma_5 \psi_n), \text{ illetve } (\bar{\psi}_e \gamma_5 \psi_{\bar{\nu}}),$$



amelyek Lorentz-transzformációkor rendre úgy transzformálódnak mint egy skalár (S), egy vektor (V), egy (kétindexes) tenzor (T), egy axiálvektor (A), és egy pszeudoskalár (P).

Könnyű belátni, hogy ha a téroperátorok deriváltjainak az előfordulását ki-zárjuk, akkor az összes lehetséges tenzort felsoroltuk. Ezek szerint a legáltalánosabb invariáns skalár a következő alakú:

$$g_S H_\beta^{(S)} + g_V H_\beta^{(V)} + g_T H_\beta^{(T)} + g_A H_\beta^{(A)} + g_P H_\beta^{(P)}.$$

Egészen 1956-ig az a meggyőződés uralkodott, hogy ezt a valóban általános ki-fejezést lehet azonosítani a gyenge kölcsönhatás  $H_\beta$  Hamilton-operátorával. Lee és Yang 1956-ban a K-mezonok bomlásának tanulmányozása alapján azt a forradal-mian új feltevést fogalmazta meg, hogy a gyenge kölcsönhatás Hamilton-operátorá-nak nem kell valódi skalárnak lenni, az is megengedhető, hogy egy skalár és egy pszeudoskalár kombinációja legyen. Ez a feltevés természetesen súlyos követke-zményekkel jár: egy ilyen Hamilton-operátor olyan átmenetet is lehetővé tesz, amely-nél a kezdő és végállapot paritása különböző, illetve egy jól meghatározott paritású kezdő állapotból kevert paritású végállapotba visz át.

Röviden a paritás nem marad meg. Hogy a kísérleti tényekkel összeegyeztet-hető-e ez a felettébb szokatlan gondolat, azt a következő fejezetben fogjuk részle-tesen elemezni. Itt most csak a lehetséges paritássértő Hamilton-operátorok közül azt az egyet mutatjuk be, amelyet a tapasztalat választott ki a végtelen sok lehető-ség közül.

Képezzük a

$$(\bar{\psi}_p \gamma_\mu (1 + a\gamma_5) \psi_n)$$

kombinációt, amely a vektor jellegű komponens mellett  $a$  amplitúdóval tartalmaz axiálvektor összetevőt. A könnyű részecskékre hasonló kombinációt képezve ered-ményül azt kapjuk, hogy

$$H_\beta = -\frac{G}{\sqrt{2}} \int (\bar{\psi}_p(x) \gamma_\mu (1 + a\gamma_5) \psi_n) (\bar{\psi}_e(x) \gamma_\mu (1 + \gamma_5) \psi_\nu(x)) dV.$$

A következő fejezetben be fogjuk látni, hogy ez az operátor, amely skalár és pszeudo-skalár tagok kombinációjából áll, valóban összhangban van a kísérleti tényekkel.

\* \* \*

Befejezésül még szeretném kiemelni, hogy a bétabomlással kapcsolatos témakö-rön kívül még számos olyan fejezete van a magfizikának, ahol Szalay Sándor tudo-mányos eredményeit lelkesítő példaként lehet felhasználni az oktatásban.



# SZALAY SÁNDOR

## SZEREPE A HAZAI KÍSÉRLETES ORVOSTUDOMÁNY FEJLŐDÉSÉBEN

DR. KOCSÁR LÁSZLÓ

az orvostudományok doktora

Szalay Sándor akadémikus több évtizedes tudományos munkásságának viszonylag kis részét adja a kísérletes orvostudomány területén végzett kutatómunka. Ilyen irányú tevékenysége azonban döntő jelentőségű volt a felszabadulás utáni magyar kísérletes orvostudomány számára, mert kezdeményezéseivel, iránymutató eredményeivel utat nyitott a modern fizikai eredmények, atommagfizikai módszerek és eljárások hazai felhasználásának ezen a fontos területén.

A magyar orvosok részéről közvetlenül a háború után megnyilvánult igény a radioizotópos technika bevezetésére kitűnő segítőre és tanítóra talált Szalay Sándor, a debreceni Tudományegyetem professzora személyében. A debreceni Tudományegyetem nagy szerencséje volt, hogy az Orvostudományi Kar keretében működött Fizikai Intézet vezetője Szalay professzor lett, aki tudományos pályafutásának már a legkezdetén eljegyezte magát az akkoriban dinamikus fejlődésnek indult atommagfizikával, keresve és kutatva egyúttal mindazokat a területeket, ahol a radioaktív jelenségek felhasználása közvetlen vagy közvetett módon hozzájárulhatott a más eszközökkel alig megközelíthető problémák megoldásához.

Az izotópos nyomjelzéstechnika és az izotóphígításos analízis elveit Hevesy György már 1913-ban, ill. 1923-ban kidolgozta, de sokat ígérő alkalmazásuk lehetőségeit erősen korlátozta, hogy akkoriban még csak a természetben előforduló radioaktív anyagok felhasználására lehetett építeni. Az izotópos nyomjelzéstechnika diadalmas pályafutását az orvosi tudományokban csak a mesterséges radioaktív izotópok (és később a stabil, dúsított izotópok) megjelenésével kezdte meg. Ez már a harmincas évek vége felé történt, és gyakorlatilag egybeesett a második világháború kitörésével.

A háborús években fellendült atommagfizikai kutatás — katonai vonatkozásai miatt — konjunkturális lehetőséget jelentett a hasadási folyamatok, az önfenntartó láncreakciók kutatása számára, de a békés célú alkalmazást jelentő orvosbiológiai nyomjelzéstechnika fejlődését lelassította. A második világháborút követő években azonban a reaktorok és gyorsítók számának gyors növekedése lehetővé tette a legkülönbözőbb radioaktív izotópok (és stabil izotópkészítmények) nagy számban és reális költséggel való előállítását, és így a kísérleti kutatómunkába, sőt a diagnosztikai és terápiás orvosi gyakorlatba való bevezetését. Végso soron e lehetőségek talaján született meg az orvostudományok egy új ága, a nukleáris medicina, amely az orvosi tudományoknak ma is egyik leggyorsabban fejlődő iránya. Nukleáris medicina nélkül ma nincsen korszerű betegellátás — gondolok itt a „non invasiv” in vivo és in vitro diagnosztikai, valamint terápiás izotópos eljárások egyre bővülő körére.

Magyarországon az orvosi izotópos nyomjelzéstechnika fogalma és gyakorlata egybeesik Szalay Sándor akadémikus nevével. Ő volt az, aki felismerve az orvosi ku-



tatások jelentőségét, segítséget adott a debreceni egyetem orvosainak, hogy az új technikát kutatásaikban felhasználják. Ezek az experimentális izotópkalkalmazási munkák teremtették meg a nukleáris medicina alapjait hazánkban.

Szalay professzor munkássága az izotópkalkalmazások területeit is kijelölte és iránymutatóan meghatározta. Az alábbi rövid ismertetésből világosan kiderül, hogy segítségével már igen korán elindultak a kutatások a kvantitatív histokémia, a gyógyszer-tani toxikológia, élettan-kórélettan, az immunológia és végül a mostanában oly nagy jelentőségűnek felismert környezetvédelemmel kapcsolatos vizsgálatok irányába. Ezek mind egy-egy nagy fejezetei az orvostudománynak, amelyeken elindulni Szalay professzor segített. A kezdeti lépések megtétele után a kutatócsoportok megerősödtek, és önállóan folytatták munkájukat.

Legyen szabad ismertetnem az orvosi kutatómunkák néhány területét, mintegy bizonyítékaul annak, hogy Szalay professzor segítsége döntő volt a magyar kísérletes orvostudomány számára. Az ismertetés nem teljes, de a munkák típusára mindig jellemző példákat fogok bemutatni.

Az első nagyjelentőségű izotópos munka, melyet Szalay professzor Barka T., Pósalaky Z. és Kertész L. munkatársakkal már kb. 1950-ben elkezdett, egy histokémiai reakciónak izotóptechnikával történő kvantitatív kivitelezésére irányult [21—23, 27].

A histokémiai reakciók nagy hátránya, hogy csak kvalitatív vizsgálatokra alkalmasak, ami kizárja az egzakt lehetőségeket. Éppen ezért számos próbálkozás történt a histokémiai reakciók kvantitatívvá tételére, gyakorlatilag eredmény nélkül.

Új utat jelentett az izotópoknak a histokémiába való bevezetése, a módszer kvantitatívvá tételére.

Ezen új módszer lényege a *Gömöri—Takumatsu-féle* foszfatáze histokémiai reakció kivitelezése ólomizotóp segítségével. Ennek lényege: a foszfatáze hidrolizálja a foszfo-monesztereket, és a felszabaduló foszforsav a szövetben és az inkubáló oldatban levő kalciumionok segítségével vízben oldatlan kalciumfoszfáttá alakul. A kalciumfoszfát ólomnitrát segítségével ólomfoszfáttá, ez pedig ammóniumsulfiddal kezelve ólom-sulfiddá alakul, amely oldhatatlan barna csapadék formájában látható a szövettani készítményekben.

Szalayék a kvantitatívvá tételt nyomjelzett ólomnitrát felhasználásával látták megoldhatónak. Ennek segítségével mérni tudták a szövetekben megkötött ólom mennyiségét, amely az enzimatiszus működés következtében szabaddá váló orto-foszforsavval ekvivalens. Sőt, a lehasított foszforsav mennyiségének ismeretében az inkubálási idő alkalmas megválasztásával az enzim mennyiségére is lehet következtetni.

A vizsgálatokhoz nyúl-, macska- és ökörszerveket használtak fel. A szokásos szövettani készítményeken végrehajtották a *Gömöri—Takumatsu*—reakciót, amelyhez olyan ólomnitrát oldatot használtak, amely tórium B ólomizotóppal volt jelezve.

A tórium B fizikai felezési ideje 10,6 óra, rendszáma 82 (azonos az óloméval), atomsúlya 212.

Lehet, hogy a tórium B nem a legalkalmasabb izotóp erre a célra, hiszen a fizikai felezési ideje aránylag rövid, és a béta-sugárzás energiája kicsiny (0,36 MeV), ami az akkor még egyetlen GM-csőves mérőberendezések számára nem volt kedvező.

A kísérletek azonban minden szempontból helyesek voltak, amit a kapott eredmények is bizonyítanak.

A munka elvi és erkölcsi jelentősége felbecsülhetetlen, mivel ez az első izotópos nyomjelzési kísérlet indította el hazánkban az ilyen irányú orvosbiológiai munkákat.



Szalay professzor ezen munkája [22] megemlíti azt, hogy a Gömöri—Takumatsu-reakció kiviteléhez  $^{32}\text{P}$ -jelzett glicero-foszfát célszerűbb lett volna, sajnos  $^{32}\text{P}$  izotóp akkor (5 évvel a második világháború befejezése után) még nem állott rendelkezésre. Mégis, ahogyan a kísérleteket tórium B-vel megtervezték és kiviteleztek, experimentális orvosbiológiai szempontból kifogástalan, igen szellemes, sőt világszinten is korszerű volt.

A munka értékét csak fokozza az a tény, hogy a GM-csőves mérőberendezés házi előállítású volt, amelyet Szalay professzor terve és útmutatásai szerint a debreceni egyetem Kísérleti Fizikai Intézetében készítettek.

Már utaltam arra, hogy Szalay professzor ezen munkáját nem sokkal a háború befejezése után kezdte el, és bátran mondhatjuk, hogy mostoha körülmények között. Mégis tudott újat adni, sőt új kutatási irányt megjelölni.

Talán a tanítómesterek iránt érzett tanítványi hála az, ami egy szubjektív analógia felismerésére készítet. Szalay akadémikus háború utáni izotópos munkája, amely elindította és meghatározta az izotópok orvosbiológiai alkalmazását hazánkban, sok tekintetben emlékeztet Hevesy György hasonló típusú kísérleteire.

A hasonlóság több szempontból látszik megalapozottnak. Sem Hevesy, sem Szalay nem dicsekedhetett azzal, hogy kutatásaik számára rendelkezésre álló anyagi erőforrások optimális kísérleti berendezések kialakítását tették volna lehetővé. Mindketten nehéz körülmények között, saját maguk tervezte és készítette kísérleti eszközökkel akartak és tudtak újat adni a tudományoknak. Ilyen körülmények között végzett eredményes munkájuk mindkettőjükénél az alkotó gondolat elsőbbségét és meghatározó voltát igazolja.

Szalay és munkacsoportja a 40-es évek végén — csakúgy, mint Hevesy klasszikusnak tekinthető munkáiban — ólomizotóppal dolgozott, mivel akkoriban csak ez a természetben előforduló radioaktív izotóp állott rendelkezésre Magyarországon. Szalay professzor érdeme, hogy felismerte azt a lehetőséget, amit a természetes radioaktív ólomizotópok nyomjelzéstechnikai alkalmazása a histokémiai (sőt másirányú biológiai) kutatások területén 1948—50-ben nyújtani tud, akkor, amikor már a mesterséges radioaktív izotópok is ismertek voltak. A Hevesy által felfedezett és a kísérleti orvosbiológiai kutatások módszereit forradalmasító radioaktív nyomjelzéstechnika keretein belül minőségileg újat jelentett a biológiai alkalmazásoknak Szalay által megmutatott iránya, amelyen belül a histokémia csak egy terület a sok közül.

Szalay Sándor orvosbiológiai vonatkozású kutatásainak egy másik fontos irányát a radioaktív izotóppal nyomjelzett kolloidok előállítása és alkalmazása jelenti.

1952-ben Szalay professzor Kertész Lászlóval és Simonyi Ágnessel megoldotta a RaE tiszta állapotban való előállítását. Ezen bizmutizotóppal jelezett bizmutszulfid kolloidot állatkísérletekben tettek vizsgálat tárgyává [25, 31].

Céljuk a reticulo-endotheliális rendszer (RES) tanulmányozása volt, főleg a funkcióváltozás kvantitatív megközelítése révén. Megállapították egyrészt, hogy a kolloidnak vérből való eltűnése két szakaszban zajlik le, amelyek élesen nem határolhatók el egymástól. Ugyanakkor különbség mutatkozik a kolloid eltűnésének gyorsaságában, ha a kolloid bevitelét 1-2 hét múlva megismétlik. A két görbe lefutásából és a kettő közötti különbségből remélték a RES aktiválásának kvantitatív értékelését.

Az üttörő munka kritikáját igen könnyű elvégezni közel három évtized távlatában, hiszen a radioaktív kolloidoknak a biológiai irodalma igen nagy lett azóta, és igen sokat tudunk ma már a különböző méretű és alapanyagú kolloidok biológiai szerepéről és jelentőségéről.



Kifogásolni lehetne azt, hogy e munka nem közli az effektív felezési idő értékeit, hogy nem adja meg a kolloidok szemcseméretét, valamint azt sem, hogy milyen az egyes (RES) szervek kolloidkötő képessége.

E munkát azonban mégis nagyra kell értékelnünk, annak ellenére, hogy Szalay professzor nemigen folytatta az izotópkolloidokkal végzett munkáit. Pedig, hogy milyen a perspektíva, amit ez a munka megnyitott, alig lehet egy rövid méltatás keretében összefoglalni. Szalayék előbb említett munkája nemcsak kísérletes orvostudományi szempontból jelentős, hanem mindenekelőtt a nukleáris diagnosztika történeti fejlődésének részeként is. A korszerű orvosi diagnosztika (amely nélkül ma már nincs korszerű betegellátás), nagy számban alkalmaz radioaktív kolloidokat mindennapi gyakorlatában. Ezeket a mikro- és makrokolloidokat használják a máj, a lép, a tüdő, az agy scintigráfias vizsgálatára, azaz izotópos leképezésére, ami lehetővé teszi az említett szervek alakjának, esetleges kóros elváltozásainak (daganat, tályog stb.) képszerű, sőt funkcionális vizsgálatát.

Természetesen ma már nem bizmutkolloidot használnak, hanem radiojóddal jelzett albumin mikro- és makroaggregátumokat, mikroszférákat, valamint generátor-termékekkel ( $^{99m}\text{Tc}$ ,  $^{113}\text{In}$ ) jelzett mikro- és makrokolloidokat.

A fémkolloidok közül az  $^{198}\text{Au}$ -kolloid, a technéciumszulfur kolloid igen jól beváltak a máj scintigráfias vizsgálatára. Májra alkalmazzuk még az inozitol-hexafoszfátot, amely intravénás beadás után a vér ionizált kalciumjával oldhatatlan, meglehetősen homogén mikrodiszperz kolloidot képez in vivo, és megfelelő szemcseméret keletkezése esetén csak a májban dúsul a RES által való felvétele útján. Szalayék pionír munkája is a RES funkciójának vizsgálatára irányult.

Ennek ellenére mondhatjuk, hogy nincsen elvi különbség az általuk végzett és mikrokolloidokkal végzett máj scintigráfias diagnosztikai eljárások között, hiszen a kolloidokkal végezhető májvizsgálat éppen a RES funkciójára alapozott.

A modern nukleáris medicina egyik rutin vizsgálóeljárása a tüdő scintigráfias vizsgálata olyan radiokolloiddal, amelynél a szemcseméret nagyobb, mint  $7-8\ \mu\text{m}$ , ezért intravénás beadás után tüdő capillarisaiban (vagy praecapillarisaiban) fennakad, és amíg lebomlik olyan méretűre, hogy az már passalni tudja a tüdőt, sugárzása révén kirajzolja azt. E célra olyan fehérjekolloidot használunk, amelynek átmérője 80 %-ban  $20-70\ \mu\text{m}$  közé esik. A sugárzó nuklid, amit erre használunk, vagy  $^{131}\text{I}$ , vagy  $^{99m}\text{Tc}$ .

E jelenségnek eddig a pontig ugyan semmi köze a RES-funkcióhoz, de amint a fehérjeszemcsék kellően lebomlottak a proteazék hatására, bekerülnek a nagyvérkörbe, ahonnan most már a máj RES szűri ki. Az egyetemes és a magyar orvostudomány bizonyára előbbre jutott volna, ha Szalay professzorék folytatták volna a radiokolloidokkal végzett kutatásaikat.

Szalay professzor igen nagy segítséget adott a Debreceni Orvostudományi Egyetem azon kutatásainak, amelyeket a különböző intézetekben, főleg a Kesztyűs Loránd professzor vezette Kórélettani és Vályi-Nagy Tibor professzor vezette Gyógyszertani Intézetben végeztek az ötvenes évek kezdetétől.

Az említett két intézet profiljának és feladatainak megfelelően a közös kutatások témája farmakológiai-toxikológiai, illetve élettani és immunológiai volt, lényegében a nyomjelzéstechnika gyógyszer-tani és kórélettani in vivo kutatásokban való alkalmazásával. Ezek a kutatások is az elsők voltak hazánkban. Ami pedig az akkor még gyermekcipőben járó immunológia tudományát illeti, az izotóptechnika itteni alkalmazása az európai élvonal szintjét jelentette. Szalay Sándor tevékenységének jelentősége nemcsak az, hogy kezdetben részt vett az izotópos munkákban, hanem az is, hogy kiké-



pezve egy kisszámú, de lelkes, orvosokból, vegyészekből, fizikusokból álló kutatógárdát (melynek e sorok szerzője is tagja volt), iskolát teremtett a hazai orvosi izotópkalmazás, messzebbmenően pedig a betegellátást szolgáló nukleáris medicina számára. Így vált lehetővé, hogy a debreceni Kórélettan Intézetben már az ötvenes évek közepén jóízűtőppal jelzett fehérjék segítségével végeztek immunológiai kutatásokat. Ez Debrecenben már akkor megtörtént, amikor még a világirodalomban is alig volt nyoma hasonló vizsgálatoknak.

Kocsár, Kesztyűs, Kertész és Vályi-Nagy voltak társszerzői annak a toxikológiai munkának [90], amelyet egy nagyvolumenű ólomtoxikológiai kísérlet végén tórium-B-vel végeztek. Az alkohol hatását tanulmányozták macskán az egyes szervek ólomfelvevő képességére. Eredményeik szerint az alkohol fokozza az ólom lerakódását az egyes szervekbe. Különösen érdekes még ma is, hogy alkohol hatására a központi idegrendszer (agy) egyes részeiben is ólom rakódik le. E vizsgálatok eredménye ma is aktuális. A motorizáció és az ipari ólomszennyeződés fokozódásának korában objektív bizonyítékot szolgáltat az alkoholnak járulékosan is károsító hatására.

Kocsár, Salánki, Kertész és Kesztyűs munkatársakkal jelent meg Szalay professzor első immunológiai tárgyú munkája [32]. Az izotóptechnika segítségével sikerült objektívan bizonyítaniok, hogy az immunológiai antitesttermelés nem idegrendszeri reflexfolyamat [32–34]. Antitesttermelés csak akkor jön létre, ha legalább minimális mennyiségű antigén bejut a szervezetbe. Az eredmény ma már több mint természetes, de amikor még olyan keveset tudtunk az immunológia lényegéről, mint akkor, az eredményt nem lehet lebecsülni. Különösen nem, ha arra gondolunk, hogy ez az idő nálunk a nervizmus divatjának a kora volt, amikor sokmindent az idegrendszer működésével hoztunk összefüggésbe.

Még ma is korszerűnek mondható az a kísérlet, amelyet — az élettani kísérletek klasszikus példaként — a kobalt-ion-adrenalin antagonizmus hatásmechanizmusa tisztázására végzett Szalay professzor, Kocsár, Újhelyi és Kesztyűs társszerzőkkel [50]. Kimutatták, hogy a Straub-szíven és nyúlbélen — ahol a fenti antagonizmus nincs meg — kobaltot a szövetek nem vesznek fel. Viszont Trendelenburg-készítményen, ahol az antagonizmus létezik, kobalttárolás, illetve felvétel kimutatható. A kísérleteket  $^{60}\text{Co}$  izotóppal és polarográfias analízissel kombináltan végezték.

Mint orvos, akinek eredeti szakmája a kórélettan és immunológia, nem érzem magam illetékesnek arra, hogy szakszerű méltatást adjak Szalay Sándor akadémikus azon munkásságáról, amely jelentőségében nem kisebb, mint az előbb említett orvosi biológiai munka. Ez pedig a manapság világszerte előtérbe került környezetvédelemmel kapcsolatos vizsgálat sorozat. Szalay Sándor már 1952-ben elkezdte id. Berényi Dénessel együtt a debreceni esővizek radioaktivitásának rendszeres vizsgálatát. Az első vizsgálat sorozat 1952 és 1957 között zajlott le, de azután is rendszeresen folytatódott. Hogy az ilyen vizsgálatoknak mi a jelentősége, azt mások szakszerűen fogják értékelni. Azt viszont feladatommak érzem, hogy a koncepció jelentőségét elismerjem. Bár a légköri atomrobbantások száma az atomsorompó-egyezmény után erősen lecsökkent, a légkör radioaktivitásának ellenőrzése a közegészségügy szempontjából mégis fontos, mivel az atomreaktorok és az atomerőművek számának megszorodása azt szükségessé teszi. Hazánkban a paksi atomerőművek üzembe állítása során az Országos „Frédéric Joliot-Curie” Sugárbiológiai és Sugáregészségügyi Kutató Intézetnek lesz a feladata, hogy hazánk különböző szféráinak, közöttük a levegőnek sugáregészségügyi ellenőrzését rendszeresen végezze. Szalay professzor koncepciója tehát ma is aktuális.



Végezetül úgy vélem, hogy Szalay Sándor akadémikus tudományos munkásságát azon a szűk területen, amely az orvosi alkalmazást illeti, nem lehet eléggé nagyra értékelni még akkor sem, ha az elismerő jelzőket felsőfokban használjuk. Azzal, hogy iskolát teremtett az experimentális orvosi kutatómunka számára, egyik megalapozója is lett a nukleáris medicinának hazánkban.

Ugyanis azok nélkül a szellemi értékek nélkül, amelyeket a „Szalay-iskola” nyújtott, alig képzelhető el olyan volumenű és színvonalú nukleáris medicina hazánkban, amilyennel ma rendelkezünk. Anélkül, hogy belebocsátkoznánk a téma részleteibe és személyes vonatkozásaiba, legyen szabad megemlíteni, hogy e sorok szerzője — a Szalay-iskola szellemi örökségének birtokában — olyan radiofarmakológiai kutató és termelő munkát végez az Országos „Frédéric Joliot-Curie” Sugárbiológiai és Sugáregészségügyi Kutató Intézet egyik főosztályán, amely képes arra, hogy ellássa a hazai orvosi izotóp-laboratóriumokat fehérje alapanyagú radioaktív gyógyszerekkel. Sőt jelentős részük exportra is készül, elősegítve ezzel a szocialista országokban az orvosi izotópdiagnosztikát.

A Szalay-iskola hírét öregbítette az a tény, hogy éveken keresztül Szalay-tanítvány, néhai Nagy János volt a vezetője és szervezője az Orvostovábbképző Intézet „Izotópdiagnosztika és terápia” című tanfolyamainak.

A Szalay-tanítványok közül számos kitűnő szakember került ki, akik nemcsak itthon, hanem külföldön is megbecsülést szereztek a magyar orvostudománynak.

Nem adnánk hí képet Szalay akadémikus szerepéről a hazai kísérletes orvostudományban, ha csak röviden és a teljesség igénye nélkül nem térnénk ki arra a szerepre, amelyet mint a MTA Atommag Kutató Intézetének alapító igazgatója, saját kutatásain túlmenően a nukleáris medicina módszereinek hazai bevezetése terén betöltött. Mint széles látókörű, a nukleáris orvostudomány lehetőségeit és távlatait az elsők között felismerő vezető, saját kutatásain túlmenően is támogatta, kezdeményezéseivel ösztönözte munkatársait és együttműködő partnereit a nukleáris módszerek orvosi-biológiai alkalmazásai területén végzett kutatásokban. Így vált lehetővé az országban elsők között a radiojóddal végzett pajzsmirigy diagnosztikai eljárások bevezetése Debrecenben, az ATOMKI munkatársainak aktív közreműködésével (Kertész—Fazakas—Orbán—Petrányi, 1958). A jóanyagcsere kísérletes vizsgálata terén az ATOMKI munkatársainak közreműködésével végzett kutatások részint stimuláló hatások befolyását vizsgálják (pl. Árvay—Lampé—Kertész—Medveczky, 1960) részint a méhen belüli magzat jóanyagcseréjének kérdéseit világították meg (lásd pl. Lampé—Kertész—Péter—Medveczky, 1961). E kísérleti munkákhoz szükséges autoradiográfias metodika kidolgozása ugyancsak az ATOMKI-ben történt (lásd pl. Medveczky—Péter—Lampé, 1962).

A felsorolást lehetne még folytatni, de ez meghaladná e rövid méltatás kereteit, hiszen Szalay akadémikus munkáin kívül is mintegy 30—40 közös közlemény ismereti e széles körű együttműködés eredményeit.

Remélem, hogy azok, akiket név szerint nem említettem meg, nem fognak nehezíteni érte.

Ez a rövid és korántsem teljes összefoglaló Szalay Sándor akadémikusnak az orvostudományt érintő munkásságáról is érzékelteti, hogy indokolt az a hála és tisztelet, amellyel az orvostudomány művelői köszöntik a kiváló tudóst 70. születésnapján.



## HIVATKOZOTT IRODALOM

A számmal jelzett hivatkozások Szalay Sándor tudományos munkáinak e füzet végén található jegyzékére utalnak.

*Kertész, L.—Fazakas, A.—Orbán, G.—Petrányi, J.:* Untersuchungen des Jodstoffwechsels der Schilddrüse mit der Ionisationskammer. *Acta Medica Hung.* 11, 405, 1958.

*Árvay, A.—Lampé, L.—Kertész, L.—Medveczky, L.:* Change of thyroid function in response to severe nervous stimulation. *Acta Endocrinologica Scand.* 35, 469, 1960.

*Lampé, L.—Kertész, L.—Péter, F.—Medveczky, L.:* Intrauterine iodine metabolism. *Acta Physiologica Hung.* 20, 11, 1961.

*Medveczky, L.—Péter, F.—Lampé, L.:* Az autoradiográfia metodikájával kapcsolatos néhány tapasztalat, *Kísérletes Orvostudomány* 14, 49, 1962.







# SZALAY SÁNDOR TÖBB ÉVTIZEDES HATÉKONY MŰKÖDÉSE A GEOTUDOMÁNYOKBAN

VOGL MÁRIA  
az MTA levelező tagja

## 1. Első lépések a hazai urán kutatásban

A második világháború utolsó hónapjaiban a világ megismerte az atomfegyverek borzalmait, a háborút követő első békés években azonban már felcsillant az atomenergia békés felhasználásának reménye is.

Ez időben hazai közeteink természetes hasadóelem-tartalmáról még nem voltak ismereteink.

Szalay Sándor, a debreceni tudományegyetem Orvostudományi Fizikai Intézetének fiatal tanszékvezető professzora és munkatársai azonban ez időben már építettek olyan Geiger—Müller-típusú sugárzásmérő berendezést, melyet kőzet-radioaktivitás terepen történő mérésére is alkalmassá tettek.

A műszer elkészülte után, (1947 tavaszán) Szalay Sándor a M. Áll. Földtani Intézet vezetőjéhez fordult és felajánlotta együttműködését terepi sugárzásmérésekhez. A probléma jelentőségét felismerve a Földtani Intézet a kutatás megindítása és anyagi támogatása mellett döntött és még az évben, 1947 nyarán megindult az első kis expedíció a Velencei-hegységi savanyú magmás kőzetek természetes radioaktivitásának helyszíni mérésére. Az expedícióban Szalay Sándor és fizikus munkatársai, a Földtani Intézet részéről pedig Földvári Aladár geológus és egy vegyész vettek részt.

Felmerülhet a kérdés, hogy miért választották a Velencei-hegységi savanyú magmatitokat első kutatásuk tárgyául, hiszen később bebizonyosodott, hogy hazánkban egészen más típusú képződményekben lehet urándúsulást találni?

Erre több nyomós érvük volt. Legfőbb indokaik a radioaktív elemek geokémiájának és teleptanának akkori ismereteiből származtak. Hozzá kell tennünk, hogy az akkori ismeretek — bár az azóta eltelt idő alatt elvben nem módosultak — a világ minden részén folyó intenzív hasadóanyag-kutatás felgyülemlett tapasztalatai alapján jelentősen és sokirányúan bővültek, kiegészültek.

Minden gyakorlati célkitűzésű földtani nyersanyagkutatás az elméleti megalapozáson kívül sok hasznát veszi az analóg teleptani körülmények tanulmányozásának. A világon azidőben ismert legfontosabb természetes uránfelhalmozódások nagy része gránit magmatizmusához kapcsolódott.

Földvári Aladár a világ akkori legfontosabb uránérctelepeit rendszerezve az előfordulások öt fő típusát említette (1948). Az öt típus közül négy valamilyen formában a gránitképződés magmás folyamataival hozható kapcsolatba. Így például a Kanadában előkerült tonnányi tömegű uránszurokérc-darabok a gránitmagmatizmus első utófolyamatának, a pegmatitos fázisnak termékeiként kerültek felszínre.

A cornwalli híres uránelőfordulás a gránitmagmatizmus második utófolyamatához, a pneumatolitos fázishoz kötődik, és a gránit és a vele kontaktusban levő idős palaköpeny érintkezési határán (esetleg magában a palában) jelenik meg.



A Curie házaspár korszakalkotó felfedezése által híressé vált jachimovi (joachimstali) telep a gránitmagmatizmus késői, legkisebb hőmérsékletű utófázisának, a hidrotermális fázisnak eredménye.

Az üledékes uránérctelepek egyik típusaként is a gránitos kőzetek ún. lehordási területeit lehet említeni, bár azóta más típusú üledékes dúsítási folyamatokat is felismertek.

Hazánkban savanyú mélységi magmatitok nagyobb felszíni kibúvásban két hegységben, a Velencei- és a Mecsek hegységben találhatók. A Szalay—Földvári-féle terepmérések a kezdeti időszakban tehát elsősorban e két területre irányultak.

A szóba jöhető területek geokémiai, teleptani ismeretekben alapuló rangsorolásánál még egy tapasztalati érv is amellel szólt, hogy a terepi méréseket a Velencei-hegységben kezdik meg. A végleges döntés előtt Szalay laboratóriumi sugárázsmérő készüléken megmérte a Földtani Intézet kőzetgyűjteményéből származó néhány Velencei-hegységi gránitminta radioaktivitását, és kimutatta, hogy az az átlagos értéket meghaladja.

Ilyen elméleti megfontolások és ilyen tapasztalati előzmények után megkezdődtek az első hazai radioaktív terepmérések. Ezzel az indítással Szalay Sándor eljegyezte magát a saját kutatási területével kapcsolatba került geológiai és geokémiai problémákkal, és tudományos pályája során — a jelen időszakot is beleértve — nem lankadó érdeklődéssel művelte és számtalan eredménnyel gazdagította ezt a tudomány-határ-területet.

A Velencei-hegységi terepi sugárázsmérések [17, 18] célratorőek és alaposak voltak. 30 km<sup>2</sup>-nyi területen 50 mérési ponton észleltek. A mérési pontokat úgy telepítették, hogy az összes kőzettípusok, az utómagmás folyamatok által létrehozott kőzetelváltozások, a felismert tektonikai-szerkezeti vonalak mentén fekvő kőzetek radioaktív sugárzására adatokat nyerjenek. A mérések azonban a rendelkezésre álló rövid idő alatt és kellő anyagi alap hiányában csak a felszínre terjedhettek ki. Tudvalevően a kőzetek sugárzáselnyelő képessége nagy, így az 1 m-nél mélyebben fekvő, eltakart képződmények aktivitására csak kellő számú mesterséges feltárás (fúrás, akna-, vagy árok mélyítés) adhatott volna felvilágosítást.

A terepi mérések gyakorlati kivitelénél, elvi megfontolások alapján, a mérőkészülékhez olyan kiképzésű észlelő fejet kapcsoltak, mely alkalmas volt arra, hogy a kőzetbe mélyített kb. 35 mm átmérőjű és 400 mm mély furatokba helyezték. A fenti eljárással a beérkező  $\gamma$ -sugárzás szempontjából a határfokot emelni és a mérési körülményeket standardizálni tudták [19, 20].

A vázolt mérési módszerrel megállapították, hogy a Velencei-hegységi gránitos kőzetek közepes radioaktív tartalma a világátlagnál nagyobb, de nem éri el az ipari kitermelésre érdemes koncentrációt. A mérési eredmények laboratóriumi finomításával a kőzetek U- és Th-tartalmát külön is meghatározták. A Velencei-hegységi gránit átlagos Th-tartalma 40–70 g/t-nak, az U-tartalma pedig 8–10 g/t-nak adódott. Ez különösen a Th szempontjából meghaladja a hasonló típusú kőzetekre vonatkozó koncentrációadatok világátlagát. A Földkéreg átlagos U-tartalma 4 g/t, Th-tartalma pedig 11 g/t Goldschmidt (ma már többször korrigált) régi adatai szerint. Taylor (1964) adatai szerint például az urán földkéregbeli átlaga 2,7 g/t, a tóriumé pedig 9,6 g/t. A kezdeti eredmények után indokolt volt Szalaynak és munkatársainak az a kutatási koncepciója, hogy a terepméréseket továbbra is gránitos területen kell folytatni.

1949-ben a Mecsek hegység savanyú kőzeteit vizsgálták meg továbbfejlesztett



terepi módszerekkel. Itt a vizsgálatok 70 km<sup>2</sup>-nyi területre terjedtek ki. A Mecsek hegységi gránitos jellegű kőzetek a Velencei-hegységi kőzeteknél valamivel nagyobb aktivitást mutattak, de kinyerésre még itt sem lehetett gondolni.

Kiindulva abból a feltételezésből, hogy gránitjaink a radioaktív elemek ősforrásai, vizsgálatra érdemessé vált az elsődleges kőzetek elmállása révén mobilissá váló radioaktív elemek további sorsa és földtani-geokémiai folyamatok révén feltételezhető feldúsulása. Érdemes volt megvizsgálni, hogy melyek azon dúsító tényezők, melyeknek hatására az üledékes kőzetekben esetleg hasznosításra is érdemes sugárzóelem-koncentrációk jelentkeznek.

1950-ben megkezdték tehát az üledékes kőzettípusok aktivitásának vizsgálatát. Már az előző évi kísérleti méréseknél feltűnt egyes üledékes kőzettípusok (szerves palák, szerves üledékek, és kőszenek) átlagon felüli sugárzóanyag-tartalma [20]. A további vizsgálatokat ezek alapján Szalay a szerves dúsító tényező kiemelkedő szerepének tisztázására irányította.

Részletesen megvizsgálták többek között a komlói szénbánya kőszénrétegeinek, a szerves agyagpaláknak és az őket kísérő üledékes kőzeteknek sugárzóanyag-tartalmát. A szén agyagpalák és a kőszénrétegek aktivitása sok helyen felülmúlta az ősforrásnak tekintett magmás kőzetekét.

Hasonló mérési eredményeket szolgáltatott a pilisszentiváni altáró egyes kőszén rétegei is, sőt itt egy-két réteg esetében minden eddigi mérési eredményt meghaladó radioaktivitást is észleltek. Ez az eredmény akkor feltűnést keltő volt, mert az irodalom akkor még nem adott hírt arról, hogy kőszenekben az U ilyen mértékben dúsul. A kezdeti eredmények bátorító hatására átnézetes radioaktív sugárzásméréseket végeztek az ország különböző kőszénterületeiről beérkező mintákon [26, 28]. Érdekes és geokémiai is figyelemre méltó az a megállapításuk, hogy a fiatalabb korú barnakőszének (pl. Hidas, Várpalota) aktivitása csekély. Az ózdi, miskolci, Mátra vidéki kőszéntelepek gyakorlatilag inaktívaknak bizonyultak, viszont a Dunántúl idősebb (liász, illetve kréta) kőszenei várakozásuknak megfelelő aktivitást mutattak. A pilisszentiváni helyszíni mérés eredménye, úgy tűnik, az egyetlen kivétel az előbb említett megfigyelés-sorozatban, mert viszonylag fiatal (eocén) kora ellenére is figyelemre méltó aktivitást mutatott.

Egy később megjelent kőszén-geokémiai dolgozat ((Szádeczky—Kardos E. és Földváriné Vogl. M., (1955)) ugyancsak a földtani kor és az ezzel párhuzamosan haladó szénüledék fok függvényében vizsgált nyomelemdúsulásokról adott számot. Bár ezek a vizsgálatok a hasadó elemekre nem terjedtek ki, más — geokémiai rokon jellegű — nyomelemek viselkedése Szalay eredményeivel párhuzamosítható. A legtöbb nyomelem általában a perm- és liászkorú kőszeneinkben dúsul, az eocénkorú kőszénektől kezdve a fiatal kőszének irányában a nyomelem-elszegényedés — néhány kivételtől eltekintve — általános jelenség. Ezek az eredmények is megerősítették Szalay és munkatársainak azt a feltételezését, hogy a savanyú kőzetek lepusztulásából származó nyomelemvándorlás a liász- és részben a krétakorban volt a legintenzívebb.

A kőszének urántartalmára Szalay és munkatársai még évek múlva is végeztek további vizsgálatokat [38, 41—44, 62]. Mivel a külszíni számlálócsöves mérések csak a  $\gamma$ -sugárzást mérik, melyek az urán bomlástermékeitől (pl. RaB, RaC, RaC' ...) erednek, felmerülhet a kérdés, nem bomlott-e meg az U és bomlástermékei között a radioaktív egyensúly? Szükségesnek látták tehát olyan analitikai módszert alkalmazni, mely az U és Th kis mennyiségeinek pontos meghatározására alkalmas.



Az U meghatározására az Almássy—Nagy—Straub-féle morinos kolorimetriás eljárást alkalmazták [38], melynél a kimutathatóság alsó határa 1 g szénhamuban 50  $\mu$ g U. Megfelelő óvintézkedések mellett a módszert sikerült uránra specifikussá tenni. A vizsgálataik azt eredményezték, hogy a  $\gamma$ -sugárzásmérés adatai összhangban vannak az analitikai eljárással nyert U-koncentrációkkal. Ebből két következtetést lehetett levonni: 1. az U és bomlástermékei között a földtani idők és történések folyamán a radioaktív egyensúly nem bomlott meg. 2. Az U mellett a szénhamuban Th nem fordul elő kimutatható mennyiségben. Az utóbbi megállapításra a Th-ra vonatkozó analitikai eljárások negatív eredményei is megerősítést nyújtottak. Ez az eredmény nem volt számukra meglepő, mert a geokémiai ismeretek alapján, melyek az U mobilitására és a Th kis geokémiai mozgékonyására vonatkoznak, eleve feltételezték, hogy a gránitos ősforrásból főként az U kerül másodlagos előfordulási helyre, ezért a szénhamuk aktivitásában is főszerepet játszik.

A szénhamuk radioaktívelem-tartalmának analitikai meghatározását az előbb vázolt eljáráson kívül Szalay és munkatársai két másik elvileg teljesen eltérő eljárással is igyekeztek tovább finomítani.

Az egyik módszer egy fotoemulziós eljárás [45, 46], melynek nagy előnye, hogy nemcsak láthatóvá válik mikroszkóp alatt az U-ból kiinduló  $\alpha$ -sugárzás pályája, de az is megállapítható, hogy a sugárzás melyik szemcséből ered. A fotoemulziós módszert finom szemcséjű ajkai kőszénhamu (pernye) U-tartalmának vizsgálatára is alkalmazták. A pernye mikroszkóp alatt morfológiailag elkülöníthető részecskéi a következők voltak: átlátszatlan és átlátszó gömböcskék és szabálytalan alakú részecskék, melyek között szintén akadt átlátszatlan és áttetsző részecske is. A magemulziós eljárás azt mutatta, hogy a pernye összes aktivitásának 66%-a az átlátszatlan gömböcskékből indul ki, 28%-a az átlátszatlan, szabálytalan alakú szemcsékből. A gömböcskék az égetés alatt összeolvadt hamukomponensek, a szabálytalan részecskék az égetésnek ellenálltak. Az urán dúsulása szempontjából tehát a pernyének alacsonyabb olvadáspontú frakciója a figyelemre méltó. Szalay és munkatársa maga elé tűzi a feladatot: az alacsony olvadáspontú szemcsék kémiai és ásványtani vizsgálatát kell elvégezni.

Az urán analitikájának egy más elven alapuló módszerével csaknem ugyanezen időben foglalkozik Szalaynak egy másik munkacsoportja. Ez az ismert fluoreszcencia-módszernek egy továbbfejlesztett, korszerűsített változata. Megtartva az alapjelenséget — uránnymokat tartalmazó alkáli-fém fluoridok fluoreszkálása ultraibolya fényben — arra törekedtek, hogy a fluoreszcencia mérését pontosabbá és objektívvé tegyék. Az észlelést elektronsokszorozó berendezéssel oldották meg; az érzékenységet így megnövelve a célkitűzésüknek megfelelő mérési eljárást nyertek [48].

Közben a hazai kőszének radioaktivitásának sorozatvizsgálata már sokkal jobb laboratóriumi és műszerezettségi feltételek mellett az időközben nagy intenzitással fejlődött ATOMKI-ban nagyobb ütemben folytatódott. Szalay és munkatársai 1956-ban zárták le az ajkai [41], a tatabányai [42] medence, a mecseki liászkorú kőszénterület [43] és a kisgyóni medence [44] urántartalmának mérését. E vizsgálatokra a M. Áll. Földtani Intézettől kaptak megbízást. A mérések részben a helyszínen, bányákban, tárókban történtek, részben az ATOMKI laboratóriumaiban. Az említett területekre vonatkozó nagyszámú mérési adatot összefoglalták, az U-koncentrációkat gyakorisági hisztogramokkal szemléltették. Az U-tartalom a vizsgált szénterületeken telepenként változó értéket mutatott, mégis a kiszámított területi átlagokkal az U-tartalom



csökkenő sorrendjében a területeket így rangsorolhatjuk:

Ajka	69 g U/tonna kőszén
Tatabánya	60 g U/tonna kőszén
Kisgyón	50 g U/tonna kőszén
Mecsek	25 g U/tonna kőszén.

A sorozatmérések látszólag tehát nem teljesen igazolták azt a néhány év előtti feltételezésüket, hogy a kőszén kora (szénülési foka) és hasadóelem-tartalma között pozitív korreláció van. Az ajkai kőszén felsőkréta korú, a tatabányai és a kisgyóni eocén korban képződött, végül a mecseki kőszén a legidősebb, liász korú. Azonban megállapításuknak az a része, hogy az U-tartalom az eocén kornál fiatalabb kőszénekben lényegesen kisebb, a sorozatvizsgálatok birtokában is megerősítést nyert.

Az előbbi ellentmondás könnyen feloldható. Szalay is sokszor hangsúlyozta, hogy a kőszén nyomelemeket, így U-t is ott tudnak jelentősen dúsítani, ahol a közelben primér nyomelemforrás van. Így elsősorban a gránitos kőzetek közelségében várható a kőszénben is nagyobb nyomelem-koncentráció. A primér nyomelemforrás döntő szerepére világít rá az a megfigyelés, hogy csak a dunántúli kőszének mutattak U-dúsulást, tehát azok, melyek a gránitos kőzeteink „lehordási területeiről” nem esnek nagyon távol. Az észak-magyarországi barna kőszén nem mutatott említésre érdemes aktivitást.

1959-ben még egy dolgozat [62] lát napvilágot Szalay és munkatársainak tollából, melyben röviden összegezik a hazai kőszénhamuk U-tartalmára vonatkozó helyszíni és laboratóriumi mérési eredményeiket és e dolgozat végén utalnak arra, hogy időközben egy jelentősen nagyobb anyagi eszközökkel működő ipari jellegű vállalat (a jelenlegi Mecseki Ércbánya Vállalat) átvette a hazai uránkutatót. Szalay és munkatársai tehát ekkor az ilyen jellegű felméréseiket lezárták, és a gyakorlati irányú feladatok helyett az urán természetes koncentrációjának geokémiai problémáival kívántak foglalkozni.

## 2. Urándúsulás szerves üledékben — humuszsavak szerepe

A nyomelem-mobilizáció egymagában nem adott geokémiai magyarázatot arra, hogy miért éppen a szerves üledékek és a kőszén dúsítják a vándorló nyomelemeket, köztük az U-t is? Szalayt foglalkoztatja a kérdés, és figyelmét a szerves dúsító tényező lényegének megismerésére összpontosította.

A szerves dúsítás lényegét illetően három munkahipotézis közül kellett valamelyiket előnyben részesíteni. Előljáróban meg kell említenünk, hogy mindhárom hipotézisnek követőivel találkozunk szakirodalmunkban.

A munkahipotézisek:

a) a szerves dúsítást még az élő növény az életfunkciói folyamán végzi és az ennek eredményeként felhalmozott nyomelemek megmaradnak a szenesedett állapotban is.

b) a már elpusztult szerves maradványok a korhadás folyamán kötik meg valamilyen formában a nyomelemeket.

c) a nyomelemek valamiféle kémiai lecsapódás (pl.  $H_2S$  jelenléte, esetleg hidroxidos lecsapódás), illetve együttcsapódás következtében kerülnek a szerves-, illetve szenes képződményekbe.



Szalay a három munkahipotézis közül az U (és több más elem) esetében az elsőt és harmadikat tudományos ellenérvek alapján nem látta döntőnek, és eleve a második elmélet mellett foglalt állást. Az állásfoglalást bizonyítékok gyűjtése követte. Ez a problémakör 1952-ben merült fel publikációiban [26], és ettől kezdve csaknem húsz éven keresztül foglalkoztatta.

Az első eldöntendő kérdés az volt, hogy az U a kőszénhamu egyéb nyomelemei közül melyekkel társul, továbbá, hogy a kőszén szerves komponenséhez kötődik-e, vagy a kőszén anorganikus komponenseinek járulékaként kerül-e a kőszén anyagába?

A társuló nyomelemek közül Szalay és munkatársai először a vanádium és a molibdén dúsulási tendenciáit vizsgálták [39]. Irodalmi adatok alapján úgy tűnt, hogy ez a két nyomelem a szenekben nagy valószínűséggel együtt dúsul. Az ATOMKI-ban végzett analitikai- kémiai munkák alapján Szalay kimondhatta azt a megállapítást, hogy az U a V-mal és a Mo-nel együtt a kőszén szerves komponenseihez kapcsolódik. Mindhárom elem dúsulásának okát tehát valamilyen szerves folyamatban kell keresni.

A szerves folyamat mibenlétének eldöntésére laboratóriumi kísérleteket végeztek [26, 29]. Korhadó mocsári növényi részek, lápföldek, tőzeg és lignit szolgáltak modell-anyagul, melyeket homoktól, földtől lehetőleg megtisztítva alkalmaztak. Az előkészített mintákat uránilnitráttal, illetve nátrium-uranilkarbonáttal érintkezésbe hozva megállapították, hogy a korhadó szerves anyag az urániumot az oldatból adszorbeálja. Az oldatból való adszorpció néhány perc alatt mennyiségileg bekövetkezett. Az adszorpciós kötés erőssége azzal jellemezhető, hogy a megkötött U-t a szerves anyagtól vízzel vagy gyengébb savakkal elválasztani nem lehet, és csak erősebb ásványi savak szabadítják ismét fel.

Mivel a lignit, sőt a barnakőszén is adszorbeálja az U-t, megállapítható volt, hogy a növényi maradvány U-megkötőképessége a földtani szenesedés folyamán megmarad.

További részletes laboratóriumi kísérletek arra a meggyőződésre vezették Szalay Sándort, hogy a humuszsav az a fontos adszorbens, mely a modellanyagoknál az U megkötéséért felelős. A megkötés  $\text{UO}_2^{2+}$  kation alakban történik [29, 49, 55].

A barnakőszén porából kivont humuszsav adszorpcióképessége U-ra sokkal nagyobb volt, mint magának a modellül szolgáló barnaszénnek.

A felismert „humuszadszorpciós elméletet” Szalay ezután sokoldalú kritikai vizsgálatnak vetette alá. A vizsgálatok először két irányban kívánták az elméletet alátámasztani. Meg kellett vizsgálni, hogy 1. a tengervízből lerakódott iszapnak, a biolitok geológiai kiinduló anyagának, van-e számottevő humusztartalma? 2. A humusz adszorpciós képessége mennyiségileg elegendő-e ahhoz, hogy a tengervíz kis U-tartalmát megkösse az irodalomból már megismert dúsítási szintig?

Az első kérdésre az irodalomban talált kielégítő és pozitív választ, a második kérdésre azonban saját kísérletekkel kellett választ keresnie, mert a humuszsav adszorpcióképességére irodalmi adat csak a kisebb atomsúlyú kationokra volt fellelhető. Szalay és munkatársainak részletes vizsgálatai a második kérdésre is megadták a megnyugtató választ. Megállapították, hogy a humuszsav az U-on kívül sok más, nagy atomsúlyú és magas vegyértékű kationt is hasonló módon adszorbeál.

A sok mérésen alapuló vizsgálatsorozat geokémiai konzekvenciáit Szalay a kősenek nyomelemdúsulásával kapcsolatban a következőképpen fogalmazza meg: *„Valószínűnek tartom, hogy ha nem is minden nagy atomsúlyú és magas vegyértékű kation feldúsulása vezethető vissza az U-hoz hasonlóan humuszsavon történő adszorpcióra,*



azonban legalábbis egy részükre ez a talált törvény kiterjeszthető, általánosítható lesz.” [29]

1963-ban a humuszsav adszorpcióképességének geokémiai jelentősége még mindig foglalkoztatja Szalayt [75–77]. Alátámasztást nyer az a felismerése, hogy a humuszsav adszorpciójának mértéke nő a kationok vegyértékével és atomsúlyával. Az  $UO^{++}$  kation adszorpció izotermája  $pH=5$ -nél optimális értéket mutatott. Megszerkesztették az uranil-kation adszorpció izotermáját lignit-huminsav preparátumon. Az izoterma kezdeti, nagyon meredek szakasza jelzi, hogy a dúsítás már akkor is bekövetkezik, ha a vizes környezetben, melyből az adszorpció történik, igen kicsi az uránkoncentráció. Megmérték a tőzeg és lignit adszorpció kapacitását: tőzeg esetén, száraz anyagra számítva 2 mequiv/g, lignit esetén pedig 0,5–0,7 mequiv/g.

Ma már tehát tudjuk, hogy a huminsavaknak egyes kationokkal szemben mutatott nagy adszorpcióképessége a geokémiában jelentős helyi elemdúsító. A szervesetlen anyagok esetében egyes agyagásványféléseknek, elsősorban a montmorillonitnak van hasonló jelentősége.

Szalay és munkacsoportja a huminsavak elemmegkötő képességének jelentőségét felismerve három irányban kísérlete meg a jelenséget hasznosítani:

- a) elméleti geokémiai szempontból
- b) gyakorlati geokémiai irányban
- c) egyéb gyakorlati célra.

a) Az elméleti geokémiai megfontolásaik főként az urán vándorlásának egyik fontos szakaszára vonatkoznak: miként kerül az U a primér kiindulási kőzetből a kőszenes képződményekbe, miközben koncentrációja az utóbbiban lényegesen megnő? A huminsavak kedvező pH esetén a jelenséget magyarázzák, azonban a huminsavnak a laboratóriumi kísérleteik során mutatott U-megkötőképessége a természetben tapasztalt értéknél sokkal nagyobb U-dúsítást is eredményezhetne. Miért nem következik be tehát nagyobb mértékű dúsítás? Ennek nyilvánvaló oka az, hogy a tőzegtelepeken áthaladó vizekben (és általában a természetes vizekben), ahonnan az adszorpció történne, az U-tartalom csekély. Ez viszont azt mutatja, hogy a kőzetekből az U-kioldódása is csekély mértékű. Az U-kioldódás folyamatára kellett tehát Szalayéknak a következő laboratóriumi kísérleteiket irányítani. Három különböző kőzettípus zúzalékát választva modellanyagul, mérték a Na-bikarbonát tartalmú vízzel 3 óra alatt kioldható U mennyiségét [86, 90, 112]. Kísérleteik folyamán a kőzetek szemcseméretére is tekintettel voltak. Kisebb szemcseméret ( $<0,2$  mm) esetén 3 óra alatt az eredetileg 3,9 g/t U tartalmú gránitból 64 mg  $UO_2$  oldódik ki, a 2,7 g/t U tartalmú riolitból ugyanennyi idő alatt 31 mg  $UO_2$ , és végül az eredetileg 1,8 g/t U tartalmú andezitből 1,10 mg  $UO_2$  kerül a vizes oldatba. A jelenség értelmezését Szalay megkísérelte, de nyitva hagyta azt a kérdést, hogy miért oldódik ki a gránitból aránytalanul több urán, mint az andezitből. A M. Áll. Földtani Intézetben azóta lefolytatott kőzetmállasztási kísérletek (Járányi I. és munkatársai) azt mutatták, hogy bár a gránit a magmás kőzetek közül az egyik legkevésbé megtámadható kőzet, azonban a benne levő biotit igen könnyen és gyorsan kioldható. Nyilvánvaló tehát, hogy a gránitban levő monaciton, vagy ortiton kívül a biotit az urán egyik fontos hordozója, így az U jól mobilizálódik. A többi kőzetben az U valószínűleg több, nehezebben oldható ásványkomponensben megoldva fordul elő.

Szalay és munkatársai az előbb vázolt kísérletsorral ismételten a legaktuálisabb földtani problémák egyikét érintették. Csak egy irodalmi adatot ragadok ki ennek illusztrálására. Szalayékkal pontosan egyidőben (1965) szovjet kutatók (Yermolayev,



N. P. és mtsai) ugyancsak az urán vizes oldatban történő természetes szállítódásával foglalkoztak. Feltételezésük szerint létezhet egy hidroxil-uranil szilikát komplex, mely úgy fogható fel, mint a hidroszilikát-ion által stabilizált hidroxil-uranil szub-kolloid.  $[(\text{UO}_2\text{OH})(\text{HSiO}_3)]$ . Szállítódás közben a pH csökkenése, vagy erős elektrolitek a komplexet megbontják és esetleg híg szulfátokkal, vagy karbonáttionokkal stabilabb uránkomplexek létesülnek. Ha a komplexeket hőhatás éri, uránát csapódik le. Ez az értelmezés a másodlagos urántelegek képződésének egyik elméleti modellje.

A humuszsavas adszorpció geokémiai szerepének elméleti továbbfejlesztését célozták az ATOMKI-ban azok a vizsgálatok, melyek az adszorpció folyamatának pontos leírására irányultak. Megállapították, hogy az U adszorpciója humuszsavon követi a Langmuir-formulát [29]. Az ebben szereplő „telítettségi kapacitás” az U esetében 1 mequ uranil-kation/1 g tözeg. A telített tözeg száraz állapotban súlyának 10%-áig tartalmazhat uránt. A természetben általában csak annyi U-t találunk a tőzgekben, amennyi az adszorpciós izoterma kezdeti szakaszának felel meg. Ennek okát — mint előbb láttuk — kereste és találta is meg Szalay.

A továbbiakban foglalkoztak a humuszsavadszorpció mechanizmusának lényegével is [100]. A humuszsavak a növények ligninjéből származnak, poliaromásváz-felépítésűek. Ez a váz nagy stabilitású, mikroorganizmusok sem támadják meg. A benne található  $-\text{COOH}$ - és  $-\text{OH}$ -csoportok ionizálható H-je cserélődik le az adszorbeált kationnal. A humifikáció alatt a humuszsavak óriás molekulákká polimerizálódnak és oldhatatlanná válnak. Ez az értelmezés magyarázatot nyújt arra, hogy az adszorptív megkötés a geológiai idők alatt is stabil marad.

b) Gyakorlati szempontból a huminsavas adszorpció általánosabb érvényű, az U-on kívül sok más elemre is vonatkozik, tehát hasznosítható elemkoncentrációk létrejöttéhez vezethet. Szalay és munkatársai a periodusos rendszer azon elemeit, melyekre a huminsav megkötőképessége jelentékeny, felsorolták [76, 77, 98]. Ilyenek (csak a gyakorlatilag fontosabbakat említve): Cr, Co, Ni, Cu, Zn, Ge, ritkaföldfémek, Zr, Pb, Bi, és az U.

Érdemes összevetni a felsorolt elemeket a kőszenekben gyakran dúsuló elemekkel. Egy-két kivételtől eltekintve az egyezés igen jó. A kőszenekben az említettek kivül dúsuló elemek nyilván inkább a szervesetlen komponensben találhatók, ilyen pl. a Sr, Ba, Ti stb. Ellentmondás egy elem esetében tűnt fel. Szalayék szerint a Pb a humuszsavakhoz jól kötődik, más szerzők pl. Otte, M. U. (1953) szerint a Pb mennyisége a kőszenekben csökkenő szervesanyag-tartalom esetén növekszik. Saját tapasztalat hiányában az ellentmondásban állást foglalni nem tudok, de valószínűnek tartom, hogy a Pb egy része kötődhet a szerves komponenshez is, más része — az Otte által vizsgált szénmintákban valószínűleg a nagyobbik része — pedig pirittel, vagy más szulfidos szervesetlen ásvánnyal kerül a kőszénképződményekbe.

c) A huminsavas adszorpció tanulmányozása Szalayban a jelenség többirányú gyakorlati hasznosításának gondolatát ébresztette [69, 72, 74, 83, 84, 94, 119]. E gondolatok nagy részét eredményes kísérletek követték. Ezek ismertetése azonban elvezetne bennünket a földtani tudományok köréből és inkább a környezetvédelem- és az agrokémia művelőinek méltatása fogja az elért eredményeket összefoglalni.

A gyakorlati földtani nyersanyagkinyerés témakörét érintik azonban Szalaynak azon laboratóriumi kísérletei, melyek annak a kérdésnek megoldására irányultak, hogy az urántartalmú kőszenek hamujának sugárzóanyag-tartalmát miként lehetne nem költséges elődúsítással növelni [68]. A következő elődúsítási módszereket próbálták ki:



1. Sugárzás alapján a darabos szenek osztályozása, és a nagyobb aktivitást mutató darabok összegyűjtése.

2. Fajsúly szerinti osztályozás.

3. Erőművek pernyéjének mágneses szeparációja.

4. Erőművek pernyéjének szemnagyság szerinti osztályozása (szitasorozatokkal). A kísérleteik azt mutatták, hogy a vázolt laboratóriumi elődúsítások mint eljárások, beváltak, de a módszerek gazdaságosságát egyelőre nem tartotta kielégítőnek.

A huminsav geokémiai szerepének további tisztázása a következő években is foglalkoztatta Szalayt. 1967-ben Szilágyi Mária munkatársával újabb adatokat közölnek adszorpciós vizsgálataikból [87]. Régebbi munkáik során nem tértek ki a V adszorpciós viselkedésére, de a szerves anyagokban található U és V korrelációjára mások is és ők is régen rámutattak. A köszénben való együttműködésük nyilvánvalóan hasonló geokémiai folyamatra (Szalayék vizsgálatai szerint huminsavadszorpció) utal. A V a természetes vizekben metavanadát-anion ( $\text{VO}_3^-$ ) alakban van jelen és ebben az alakban migrál. A metavanadát-aniont a huminsav nem köti meg, de ha redukáló környezet áll elő, akkor a ( $\text{VO}_3^-$ ) anion ( $\text{VO}^{2+}$ ) ionná redukálódik, ez a forma alkalmas a huminsavon való megkötésre.

A V esetében azonban meg kell említenünk, hogy az nemcsak a köszénképződés folyamán, hanem a kőolaj, bitumen keletkezése során is jelentősen dúsul. A vanádium származásával a kőolajtartalmú képződményekben már régebben is többen foglalkoztak. Genetikai elméletek születtek, melyek közül a legnépszerűbbnek a vanádiumporfirin-komplex elmélet bizonyult. A porfirin-komplex elmélet abban tér el lényegesen a huminsav elmélettől, hogy míg az utóbbi a dúsítás folyamatát a szerves élet elpusztulása utánra teszi és a szerves korhadáshoz köti, addig a porfirin elmélet szerint egyes elemeket az élő állati szervezet festékanyagával (hemoglobinnal) és a növényi szervezet festékanyagával (klorofillal) genetikai kapcsolatban álló porfirenek a szervezet élő állapotában kötik meg. Kőolajokból már régebben sikerült is V-porfirin komplexeket extrahálni (l. pl. Treibs, A. (1935) dolgozatát).

Ez a jelenség azonban nem áll szemben Szalay megállapításaival, mert a porfirin elmélet inkább a kőolajokban észlelt eleműdüléseket írja le, a köszénben való dúsulást viszont a huminsav elmélet jól értelmezi. Elképzelhető az is, hogy bizonyos körülmények esetén mindkét dúsító tényező szerephez juthat és hatásukban erősítik egymást. A természetben lejátszódó folyamatok olyan összetettek, hogy bármely oldalról való közelítés eleve nem zárhat ki egy párhuzamosan haladó másik folyamatot sem.

Az 1972-ben Budapesten tartott VI. Szénkémiai Anketon, — mely az ásványi humuszhozó, humuszvegyületek kutatási és hasznosítási eredményeit tárgyalta — Szalay munkatársa, Szilágyi Mária ismét újabb kísérleti eredményekről számolt be. Újabb vizsgálataik azt bizonyították, hogy a huminsavak a laboratóriumban és a természetben egyaránt reverzibilis redoxi-rendszerként viselkednek. Ebből következik, hogy a fémek abban a vegyértékállapotban kötődnek a huminsavakhoz, amelyet huminsavak redoxiparaméterei ( $E_h$ , pH) az adott kísérleti körülmények mellett megengednek.

Szalay Sándornak a huminsavas adszorpcióra vonatkozó sokirányú vizsgálódásai a geokémia irodalmában jelentős visszhangra találtak. Munkája nyomán hivatkozások, gondolatébresztések, elméleti továbbfejlesztések mutathatók ki, amik a kutatómunka eredményességének érzékeny fokmérői. Az újabb irodalomból csak egyetlen példát ragadok ki az elmondottak alátámasztására: Baker W. E. (1973) megerősíti



Szalay azon megfigyelését, hogy a bizmut „humínofil” és az antimon „humínofob” karakterű. Baker megkísérli az eltérés okát a két elem vegyértékváltozásában mutató különbözőségekkal magyarázni. Az utóbbi szerző egyébként a humuszsavaknak még általánosabb érvényű geokémiai jelentőséget tulajdonít, mert a Szalayék által tanulmányozott adszorpciós folyamaton kívül a közetmállasztás kemizmusában is kiemeli szerepét. Erről számos más irodalmi adat is található.

### 3. Urán — hidrogeokémia

Az urán geokémiájára vonatkozó megfontolások teljességéhez hozzátartozott, hogy a természetes vízrendszerek urántartalmát és annak változásait is behatóan vizsgálják, hiszen a természetes vizek az uránszállítás fontos eszközei.

A természetes vizekben és a légkörben található radioaktív izotópokat Szalay eredetük szerint három csoportba osztotta: *a)* a természetben előforduló radioaktív elemek és azok bomlástermékei, *b)* a kozmikus sugárzás által a légkörben indukált „mesterséges” radioaktív izotópok, *c)* az emberi tevékenység által létrehozott mesterséges radioaktív izotópok. Geokémiai szempontból csak az *a)* és *b)* módon létrejött radioaktív izotópokkal kell foglalkozni, a *c)* tényező vizsgálata viszont napjainkban igen fontos veszélyeztetett környezetünk védelme szempontjából.

A vizek urántartalmának meghatározására az ATOMKI-ban egy fluoreszcenciás módszert adaptáltak és tökéletesítettek. A módszer segítségével 1 liter vízben  $0,01 \mu\text{g U}$  még könnyen kimutatható. Scherf Emil geológus közreműködésével a Tokaji-hegységben és annak nyugati és déli előterében az említett eljárással 341 természetes vízminta U-tartalmát vizsgálták meg [67]. Ez a részletes vizsgálat — mint említettük — egy hiányzó láncszemét képezte annak a Szalay által felállított geokémiai ciklusfolyamatnak, mely a szerves anyagokban dúsuló urán előzetes migrálásának történetét leírja.

A természetes vízmintákban mért urántartalmak geokémiai értékelése igen gondos elméleti megfontolásokat tett szükségessé. Figyelembe vették Saukoff, A. A. (1956) megállapítását, mely szerint az U-háttér a természetes vizekben a közetviszonyoktól és a klimatikus viszonyoktól függő területi változást mutat és általában  $0,01 \mu\text{g/l} - 50 \mu\text{g/l}$  érték között jelentkezik. Saukoff tanácsa szerint uránprospekció esetén csak akkor tekinthető a vizek U-tartalma pozitív indikációnak, ha az a területi háttérnek legalább 10–20-szorosa.

A háttér fogalma a természetes vizek U-tartalmára vonatkozóan nem látszott kellően tisztázottnak. A fogalom pontosítása érdekében Szalay és Scherf saját vizsgálati eredményeik alapján matematikai statisztikai eljárást alkalmaztak.

Geokémiai alapállásból kiindulva a vizsgált vizeket aszerint csoportosították, hogy milyen közettípusból származnak. A víz anyaközetének magmás, vagy üledékes jellege mellett, az üledékes kőzeteket kor (és részben fácies) szerint is alcsoportokra bontották. Mint a természetben általában, a geokémiában is igen gyakori, hogy a szóródó megfigyelési adatokat sokkal könnyebb lognormál eloszlási görbékkel jellemezni, mint egyszerű Gauss-görbékkel. Szalay és Scherf a különböző csoportba osztott vízminták urántartalmának eloszlását szintén logaritmikus normál eloszlási görbékkel írták le. Az oldódás folyamatának valószínűségi statisztikai értelmezése a nyomelemkoncentrációk lognormál eloszlását magyarázza.



Geokémiai érdekességű Szalay és Scherf azon tapasztalata, hogy közel azonos U-tartalmú üledékes kőzetekből származó vizek U-koncentrációja igen különböző is lehet. Felmerülhetett volna a gondolat, hogy a vizek eltérő kémiai jellege lehetne a különbözőség okozója. Megállapították azonban, hogy sem a vizek pH-ja, sem  $\text{Cl}^-$ -ion tartalma nem párhuzamosítható az U-tartalmukkal. Az eltérés okát tehát az üledékes anyakőzetben kellett keresniük. Lényeges tényező az oldódás szempontjából az, hogy a kőzet szemcseméreteitől függő belső felületek, melyeket a víz átjárhat, mekkorák. Megállapították, hogy a vizek literenkénti U-tartalmának logaritmus a kőzet csökkenő szemcsenagyságának irányába tolódó maximumot mutat.

#### 4. Radioaktivitás a légkörben

A geokémiai vizsgálatok teljességéhez az is hozzátartozott, hogy kőzetek és vizek természetes hasadóanyag-tartalmának vizsgálata mellett a Föld harmadik szférájának, a légkörnek a vizsgálata is megtörténjen.

Egy régebbi időpontban (1955) Berényi D. sen. társszerzővel Szalay arról adott hírt, hogy 1952 több hónapos időintervallumában a hullott csapadékban — a világ különböző helyein végzett atomrobbantások következtében — megnövekedett aktivitási időszakokat észleltek.

1952 után, több éven át végeztek az előbbihez hasonló rendszeres légköri csapadékaktivitás-mérést [59, 60, 63, 71, 79, 89, 97, 106]. Az esetek nagy részében a kísérleti atomrobbantások hatása Debrecen légkörében kimutatható volt. Ha ezt a munkát geokémiailag értékeljük, akkor a „háttér”-aktivitás és annak származása tarthat számat érdeklődésre. A megemelkedett aktivitás észlelése átvezet a környezetvédelem, a légkörszennyezés igencsak aktuális problémakörébe.

#### 5. A „primordiális” atmoszféra

Az űrkutatás révén napjainkban a Földünkre vonatkozó földtani és geokémiai megfigyelések kiegészülhetnek a Hold és naprendszerünk egyes bolygóinak vizsgálatával. A különböző fejlődési stádiumban levő égitestek tanulmányozása hozzávezet bennünket ahhoz, hogy a Föld korai történetének rekonstruálását is jobban megközelíthessük. Szalay újabb írásai elárulják, hogy nagy érdeklődéssel figyeli a bolygókutatás eredményeit és a belőlük levonható következtetéseket. Figyelmét különösen a bolygók légkörének és a Föld jelenlegi légkörének eltérő összetétele kötötte le és felvetődik benne a kérdés, miként lehetne a Föld történetének kezdeti időszakára extrapolálni a légkör fejlődésére megismert folyamatokat, vagyis miként lehetne spekulatív úton meghatározni, vagy esetleg vizsgálatokkal felderíteni a Föld ún. „primordiális” légkörének összetételét?

Azt a tényt, hogy a Föld légkörének kémiai összetétele a földtörténet folyamán jelentős változásokon ment át, ma már mindenki vallja, tárgyi bizonyítékokat és a pontosabb összetétel-változásokra vonatkozó adatokat azonban gyűjteni kell.

Szalay és munkatársai 1975 elején hozzákezdtek idős kőzetek gázzárványainak vizsgálatához. Feltételezhető, hogy a gázzárványok a Föld „primordiális” légkörének maradványai, és jelenlegi összetételükkel azt reprezentálják.



A mérések elvégzéséhez korszerű, nagy érzékenységgű berendezésekre volt szükség, ezeket sikerült megszerezni, illetve megépíteni. A kőzetet 0,6 mm szemnagyságra előtörték és a zúzalékot ultravakuumban melegítés közben finom porrá törték, a kőzetből felszabaduló gázokat összegyűjtötték. A felszabadult gáz elemzése nagy érzékenységgű kvadrupól-elektrosztatikus tömegspektrométerrel történt.

Vizsgálatra került egy Minnesotából származó három és fél millió éves gneisz minta gázzárványa. Az elemzés sok  $H_2O$  és  $CO_2$  mellett nitrogént, metánt, hidrogént, argont jelzett, de oxigén nyomokban sem volt kimutatható. Ez utóbbi összhangban van azzal a sokak által vallott felismeréssel, hogy a Földünk „primordiális” atmoszférája redukáló jellegű lehetett. Később különböző korú, de változatlanul idősebb, különböző helyekről származó kőzetmintákat is vizsgálat alá vontak; oxigént egyikben sem találtak és a jelenlevő metán és hidrogén mindegyik esetben redukáló jellegre mutat [128, 135].

A „primordiális” atmoszférára vonatkozó méréseiket idős kőzetmintákon Szalay és munkatársai tovább folytatják, és a meghatározási módszer pontosítását is célul tűzték ki.

## 6. Utószó

Az eddigiekben vázoltuk Szalay Sándor kutatási tevékenységének azt a részét, mely a geotudományok körébe sorolható. Felsorolásunk nem lenne teljes, ha nem térnénk ki azokra a geokémiai vizsgálatokra, melyek nem tekinthetők közvetlenül Szalay munkájának, melyek azonban a hosszú időn keresztül általa vezetett Kutató Intézet (ATOMKI) munkatársainak kutatási eredményei. Ezek a kutatások tanúskodnak arról, hogy az Intézet irányítójának érdeklődése a geokémiai problémák iránt a munkatársakat is ez irányban ösztönözte. A teljesség igénye nélkül csak néhány nevet és munkát emelek ki ezek közül. Megemlítem Sámsoni Zoltánt, aki geokémiai nyomelemvizsgálataival gazdagította ismereteinket. Hiányt pótlóak a hazai földtani kutatásainkban azok az izotópgeokémiai és radioaktív kormeghatározási (geokronológiai) munkák, melyeket Kovách Ádám és Balogh Kadosa végeztek és végeznek. Mindhárom kutató tollából számos publikáció tanúsítja eredményes tevékenységüket. Szalay szerepe e munkákban az ösztönzés és a támogatás, továbbá az Intézet kutatási profiljának ilyen irányú formálása. Saját szavait idézve: „...az ATOMKI-nak, annak megindulásától kezdve — a tiszta magfizika mellett — erősen interdiszciplináris fejlesztési irányt is igyekeztem adni.” Az interdiszciplináris kutatások napjainkban felismert fontossága tehát Szalay számára már több évtizeddel ezelőtt is nyilvánvaló volt.

Befejezésül méltatnunk kell Szalay Sándornak a tudományok határterületén kifejtett tevékenységét az egyik társtudomány — a geotudományok — szemszögéből.

Két szempontból tekinthetők e munkák igen fontosnak és jelentősnek:

1. Olyan korszerű berendezésekkel és vizsgálati eljárásokkal sietett a hazai földtani kutatómunka segítségére, mellyel a földtani kutatóhelyek az adott időben nem rendelkeztek.

2. A geotudományokkal kapcsolatos munkái a hazai kutatásban minden esetben kezdeményező voltak, új kutatási irányokat nyitottak. Mindig ott és abban segített, ami a maga idejében a legaktuálisabb volt. Külön érdeme, hogy ráirányította a hazai szakemberek figyelmét a szerves geokémiára, ami nálunk csak az utóbbi években fejlődött ki.



Szalay Sándornak a geotudományokbeli tevékenységét úgy szerettem volna összefoglalni, hogy bemutassam azt a logikusan következetes kutatási módszert, mely egész munkáját jellemezte. Nem tudom, elértem-e célomat. Jól követhető, hogy attól az indítástól, melyet a Velencei-hegységi gránitok terepei sugárázsmérése jelentett, a geokémiai elemvándorlás és elemdúsulás beható tanulmányozásán keresztül egyre bővülő érdeklődési körrel és egyre mélyebbre nyúlva a problémák gyökere felé, eljutott a Földtörténet egyik legaktuálisabb problematikájához: Földünk korai időszakának vizsgálatához.

Kívánjuk és reméljük, hogy ezt a több évtizedes, igen gyümölcsöző fizikus-geológus határterületi kutatást Szalay még további sok és értékes kutatási eredménnyel fogja gazdagítani.

#### HIVATKOZOTT IRODALOM

A számmal jelzett hivatkozások Szalay Sándor tudományos munkáinak e füzet végén található jegyzékére utalnak.

- Baker, W. E.*: The role of humic acids from Tasmanian podzolic soils. — *Geochim. Cosmochim. Acta*, 37, 269, 1973.
- Földvári A.*: A magyarországi radioaktív anyagkutatás földtani és közettani vonatkozásai. — *M. Áll. Földtani Int. Évi Jelentése 1948-ról*, 10, 35, 1948.
- Földvári A.*: Geochemistry of radioactive substances contained in the Mecsek Mountains. — *Acta Geol. Ac. Sci. Hung.* 1, 37, 1952.
- Otte M. U.*: Spurenelemente in einigen deutschen Steinkohlen. — *Chemie der Erde*, 16, 239, 1953.
- Saukoff, A. A.*: — Proceed. of the Internal. Confer. on the Peaceful Uses of Atomic Energy, held in Geneva 8. Aug. — 20. Aug. 756. 1956.
- Szádeczky-Kardoss E. és Földváriné Vogl M.*: Geokémiai vizsgálatok magyarországi kőszenek hamuin. — *Földtani Közlöny*, 85, 7, 1955.
- Szilágyi M.*: Fémionok vegyértékváltozásai huminsavakkal kölcsönhatásban. — A VI. Szénkémiai Ankét (1972. V. 4—5) anyaga. 93. 1972.
- Taylor, S. R.*: Abundance of chemical elements in the continental crust: a new table. — *Geochim. Cosmochim. Acta*, 28, 1273, 1964.
- Treibs, A.*: Organic mineral substances III. chlorophyll and hemin derivatives in bituminous rocks, petroleums, coals and phosphorites. — *Ann. Chem.* 517, 172, 1935.
- Yermolayev, N. P., Zhidikova, A. P. and Zaminskij V. A.*: Transport of uranium in aqueous solutions in the form of complex silicate ions. — *Geochemistry Intern.* 2, 629, 1965.







# SZALAY SÁNDOR MUNKÁSSÁGA AZ AGRÁRTUDOMÁNYOK TERÜLETÉN

BELÁK SÁNDOR

az MTA levelező tagja

Szalay Sándor egyike azon kisszámú tudósoknak, akiknek érdeklődése nem maradt meg szorosan vett szakterületének határain belül. Mint a természet egészét szerető és annak mélyebb összefüggéseit megismerni kívánó tudós, előszeretettel foglalkozott interdiszciplináris jellegű kutatásokkal. Így került sor harminc évvel ezelőtt, 1948-ban a Nature hasábjain első urán-geokémiai kutatási eredményeinek [17] közlésére. Ezzel vette kezdetét az a széles körű, több éves geokémiai kutatási program, amelyből évekkel később Szalay agrokémiai irányú kutatásai is kifejlődtek. E vizsgálatai során jutott arra a felfedezésre, hogy a széntelepekben kimutatott uránium-feldúsulás oka az, hogy a szenesedési folyamatok legelső fázisában, a tözegesedés során, a víz alatt korduló növényzetben nagy mennyiségben keletkező humuszsavak az urániumot még igen híg vizes oldatokból is igen erősen és gyorsan adszorbeálják [29, 75, 49, 55]. A későbbi vizsgálatok során Szabó Ilonával és Szilágyi Máriával együtt kiderítették, hogy ez az ionszorpció folyamat nemcsak az uránium esetére vonatkozik, hanem egész sor egyéb, nagyobb atomsúlyú nehéz fém kationjaira is [72, 75, 76, 98]. Ezt követően Szalay és munkatársai a tözeghuminsavak különböző elemekre vonatkozó ionadszorpció képességének kvantitatív mérőszámait is megállapították. Ezt a számértéket Szalay visszatartási tényezőnek (Retention Factor = R. F.) nevezi, amely egy adott tözegen, adott pH mellett a súlyegységnyi tözegen szorbeált elem milliekvivalensekben kifejezett koncentrációjának viszonyát adja meg ugyanazon atomnak a vele szabadon érintkező súlyegységnyi vízben mért, milliekvivalensekben kifejezett koncentrációjával szemben a szorpció egyensúly beállása után.

Ez a visszatartási tényező különböző elemeknél más-más, általában  $10^2$ – $10^4$  között van. A tözegek szorpció tulajdonságainak másik fontos mérőszáma a szorpció kapacitás. Ez utóbbi általában 1-2 milliekvivalens/g szokott lenni.

Azoknak az elemeknek sorába, amelyekre vonatkozólag Szalay megállapította a tözeghuminsavakon történő erős szorpció kötődést, tartozik a Fe, Mn, Zn, Cu és a Co is. Ezek az elemek tudvalevőleg az élő szervezetek számára kiemelkedő fontosságú, nélkülözhetetlen mikrotápelemek. A megkötést kb. 10 000:1 arányú megoszlási hányados jellemzi, azaz a szorpció egyensúly beállta után a fémionok szinte „eltűnnek” a talajvízből és koncentrációjuk cca. 1/10 000-ed része a tözegen mutatókoncentrációnak. Ez az új jelenség okozza a nyomfémek feldúsulását tözegen, ugyanakkor „eltűnésüket” a talajvízből. Szalay és Szilágyi megállapították, hogy a növények szempontjából fontos mikroelemek közül a bór kivételével az oldhatatlan tözeghumuszsavak valamennyit megkötik kisebb-nagyobb, de többnyire többezerszeres megkötési tényezővel [75, 76]. Radioizotópokkal végzett vizsgálataikból derült ki később, hogy az ionos oldott állapotban a talajba mesterségesen juttatott mikroelemek is



ugyanilyen nagy visszatartási tényezővel megkötődnek a tőzeghumuszsavakon és a növények számára szinte hozzáférhetetlenné válnak. E bioelemek tőzeghuminsavakon való erős megkötődésének ténye vezette Szalayt 1966-ban arra a gondolatra, hogy valószínűleg okozati összefüggés áll fenn a növényi életműködés számára nélkülözhetetlen mikroelemeknek a tőzeghuminsavakon való erős megkötődése és a tőzeges láptalajokon élő növényeknél rendszeresen fellépő tápanyagellátási zavarok között [92, 94]. Szalaynak az agrártudományok területén kifejtett munkássága tehát ilyen előzmények után lényegileg ekkor kezdődött, a láptalajokon termesztett növények mikroelem-felvételi nehézségeinek tudományos vizsgálatával.

Természetesen hazánkban már előtte is sokan foglalkoztak a tőzegeknek, lápoknak különböző problémáival. Már az 1900-as évek elején készültek az első tanulmányok a hazai lápok többoldalú hasznosítására. (László 1913, Dorner 1916). 1920 és 1940 között is többen foglalkoztak tőzeges, lápos talajaink különböző problémáival (Fáber 1927, Glaser 1929, Kenessey 1929, Gyárfás 1943). A lápterületek szélesebb körű felhasználására irányuló kutatás azonban csak 1950-től indult meg. Belák (1952), Kemenes (1954) és Tóth (1956) megállapítják a hasznosítás legkedvezőbb módját, Belák (1955, 1958) a növények vízigényével, Kemenes (1959) az ökonómiával, Tóth (1960) a tápanyag-gazdálkodás megoldásával kapcsolatban érnek el eredményeket. Az eljárások hatására az egyéb talajtípusokon eddig ismeretlen, szokatlanul nagy terméshozamokat lehetett elérni. A gyakorlat során azonban feltűnt, hogy az egyébként külsőleg teljesen kielégítő takarmány kedvezőtlen hatást vált ki az állattartásban. Az állatok fejlődése visszaesik, életfunkcióikban kedvezőtlen változások következnek be. Tóth (1961, 1962) a lápi takarmány biológiai értékét a beltartalom kedvezőtlen összetételében keresi. Bár a biológiai értéket befolyásoló tényezőkre nem ad választ, mégis a mikroelemek alkalmazását szorgalmazza. Voisin (1964), Tölgyesi és Mócsi (1960), Győri (1958) sokoldalú vizsgálattal bírálják a lápon termesztett növények értékét. Véleményük szerint a kedvezőtlen hatást a mikroelem-ellátásban, a tápanyagarányok eltolódásában kell keresni.

Belák (1958), Tóth és Szabó (1959) a mikroelemek alkalmazhatóságát és hatékonyságát vizsgálják. Az alkalmazott mikroelemek hatására a növények szignifikáns terméskülönbséggel reagálnak. Megállapítják a mikroelem okozta terméshozam-változásokat, de a növény által felvett mikrotápanyagok mennyiségét, valamint a talaj viselkedését a mikroelemekkel szemben még nem vizsgálják. Amikor Győri (1967) részletesen tanulmányozza a hazai lápok mikroelem-tartalmát, Tölgyesi és Haraszi (1963, 1965, 1965a, 1967) pedig a növények által felvett mennyiséget, kitűnik, hogy a mikroelem-ellátásban a talaj biogén eredete a legfontosabb meghatározó. A külföldi irodalomban például Pejve (1961) könyvében részletesen foglalkozik növények mikroelem-felvételével különböző típusú talajokon. Észlelték, hogy tőzeges láptalajokon a mikroelem-éhezés igen gyakori. A nemzetközi irodalomban számos helyen találunk utalást arra, hogy egyes mikroelemek (például réz) erősen megkötődnek a talaj organikus anyagtartalmán.

Egészen más úton jutottak ezen jelenség okának felderítéséhez Szalay és munkatársai.

Szalay hipotézise az volt, hogy amennyiben a tőzeghuminsavak a mikroelemeket (Fe, Mn, Zn, Cu, Co, Mo) laboratóriumi preparátumokon erős szorpciós kötéssel kötve tartják, valószínűleg természetes körülmények között is érvényesülnek többé-kevésbé ezek a törvényszerűségek, és így ezzel jól értelmezhető lenne a láptalajokon élő növények „mikroelem-éhezése” [98, 92, 94].



A szorpciós jelenségeken kívül a termőtalajban sok más hatás is érvényesül. A tiszta laboratóriumi körülmények között végzett szorpciós vizsgálatokkal szemben a tőzeges talajok sokféle kationt tartalmaznak, többnyire telítve vannak kalciummal, tehát kevert szorpció van. A pH érték is eltérő a különböző talajokban. Az oxidatív degradáció (kötösodás) folyamán alacsony molekulásúlyú, vízben oldható huminsavtermékek szabadulnak fel, amelyek között kelátképzők is vannak, és a szorbeált kationokat az oldhatatlan, nagy molekulásúlyú huminsavakról mozgósíthatják. Ettől függetlenül a növények minimális szükséglete a különböző mikroelemekből a genetikai fejlődés folyamán alakult ki, így fejenként és mikroelemenként is nagyon különböző.

Az első lépés az volt, hogy Szalay munkatársaival (Sámsoni Z., Szilágyi M., valamint a Keszthelyi Agrártudományi Egyetem részéről Belák S., Győri D., Tóth A.) együtt nagyszámú növényanalízist, talajanalízist és tenyészedényes kísérletet végeztek (Tóth 1969 [103, 101, 102, 110]). Ezeket a kísérleteket eleinte a Keszthely környéki láptalajokon folytatták, majd később Magyarország csaknem valamennyi számbavehető láptalajterületére kiterjesztették. Több információ nyerése érdekében több, különböző növénycsaládba tartozó jelzőnövényt alkalmaztak (szudáni cirokfű, köles, mustár, borsó, zab, kukorica, lucerna, szója, vöröshere, fehér mustár). A kísérletek részben tenyészedényekben, részben szabadföldi kis- és középparcellákon történtek. Ezek mellett, összehasonlításképp, ugyanezekkel a növényekkel jó minőségű ásványi talajokon is végeztek tenyészedényes és szabadföldi kísérleteket. Ezenkívül nagyszámú vadontermő növényt is megvizsgáltak.

Az összegyűjtött hatalmas anyag lehetővé tette több, egymástól földrajzilag független tőzeges talajon termett különböző növény mikroelem-tartalmának összehasonlítását néhány jó termőképeségű ásványi talajon termett növény mikroelem-tartalmával a naptári hónapok függvényében is. [107, 111, 119, 122, 121, 46, 125, 123, 124, 104]. Szalay és munkatársai a kukorica növény feltételezett minimális Mn-szükségletét 25–30 ppm-ben állapították meg, a szarvasmarhák minimális Mn-szükséglete pedig 50–60 ppm. A tőzeges talajokon termett kukoricalevél és -szár közepes Mn-tartalma  $15,7 \pm 1,2$  ppm, mely nem elegendő a kukorica saját szükségletének ellátására sem, de különösen kevés szarvasmarhák takarmányozása szempontjából. Jóval kisebb, mint a jól termő ásványi talajokon kapott  $59,4 \pm 4,4$  ppm átlagos Mn-tartalom, ami elegendő a takarmányozás céljaira. A Mn-tartalom a különböző növényeknél sem egyforma, és amint az adatok számítógépes kiértékelése mutatta, erősen csökken a növényfejlődési ciklus második felében, (augusztus—október hónapokban).

A növényminták részfelvételére vonatkozó analitikai eredményeik tőzeges talajokon, szembeállítva jó termőképeségű ásványi talajokkal, augusztus—október hónapokra vonatkoztatva, azt mutatják, hogy a mangánhoz hasonlóan a réztartalom is főleg a tenyészidő második felében kezd csökkenni. A kukorica részfelvétele lényegesen (mintegy 30%-kal) kisebb a tőzeges talajokon. Itt a Cu-tartalom középértéke  $6,24 \pm 0,46$  ppm-nek, míg a jól termő ásványi talajokon  $8,91 \pm 0,67$  ppm-nek adódott.

Ismeretes, hogy hazai tőzeges talajokon a növények túlságosan sok Mo-t vesznek fel (Tölgyesi 1965). Ezt Szalay és munkatársai vizsgálatai is megerősítik. A tőzeges talajokon termett növények Mo-tartalma középértékben mintegy hétszerese az ásványi talajokon termett növényekének.

A nagymérvű Mo-felvétel és ugyanekkor a hiányos Mn- és Cu-ellátottság rendkívül előnytelenek az állatok takarmányozása szempontjából. Jól ismeretes, hogy az



állatoknak a mikroelemekből bizonyos kedvező arányra van szükségük az optimális fejlődéshez. A túl nagy Mo-tartalom akadályozza a réz felvételét és így fokozza az állatok rézhiányát. Robinson—Dever (1956), Horváth—Nacsev (1972), Tölgyesi (1965) szerint a kedvező Cu/Mo arány a takarmányban kb. 5:1—10:1.

A következő táblázat a vizsgált növényfajták szerinti bontásban szemlélteti a Mn/Mo- és a Cu/Mo-arányokat külön a tőzeges talajokról és a jól termő ásványi talajokról begyűjtött mintákra vonatkoztatva, Szalay és munkatársainak vizsgálatai szerint [124].

Növényfajta és család	Minták sz.		Cu/Mo-arány		Mn/Mo-arány	
	tőzeges	ásványi	tőzeges	ásványi	tőzeges	ásványi
	talajon					
Kukorica	233	64	2,51	14,90	9,70	137,60
Lucerna	228	30	1,34	6,65	6,00	44,70
Gramineae	362	91	0,87	3,77	7,60	29,70
Papillionaceae	457	144	0,63	4,56	3,10	31,70
Vadon termő növények	104	103	5,60	16,10	19,10	154,60

A fentiekén kívül a többi mikroelemnél (Fe, Zn, Co, B) nem találtak kiemelkedő rendellenességet. A tőzeges talajon termett növények vastartalma is általában kisebb az ásványi talajokon termett növényekénél, de olyan mérvű csökkenést, amit hiánynak lehetne nevezni, általában nem találtak. Cink és bór esetében sem találtak csökkenést a tőzeges talajon termett növényeknél.

Az említett kísérletek és vizsgálatok több évet vettek igénybe, és ezek alapján fokozatosan alakította ki Szalay munkatársaival együtt a láptalajokon élő növények mikroelem-gazdálkodási mechanizmusának törvényszerűségeit. Ezek szerint:

1. A láptalajokon élő növényeknél általában kisebb-nagyobb mértékű mikroelemhiány lép fel.

2. A mikroelemhiány annak ellenére is fellép, hogy a láptalajokban legtöbbször kielégítő mennyiségben jelen vannak a kérdéses mikroelemek.

3. A mikroelemhiányt a talajban nagy mennyiségben jelenlevő oldhatatlan humuszsavak okozzák, amelyeken erős ionszorpciók kötással le vannak kötve a mikroelemek.

4. A mikroelemhiány mértéke több tényezőtől függ.

5. A nagyobb részben bomlatlan, tőzeges láptalajokon nagyobb fokú a mikroelemhiány, mint az oxidálódó kotos láptalajokon.

6. A mikroelemek felvételének akadályozottsága különböző növénycsaládoknál különböző mértékű. A legerősebb mértékű a Poaceae (Gramineae) családnál, a leggyengébb a Fabaceae (Papillionaceae) családnál.

7. A mikroelemek felvétele a tenyésztő első felében sokszor kielégítő mértékű, a tenyésztő második felében lép fel a fokozatosan erősödő mikroelemhiány. Ez azzal magyarázható, hogy a nyári, melegebb hónapok során a növény fejlődésének meggyorsulásával már nem képes lépést tartani az akadályozott mikro-elemfelvétel.



8. A mikroelem-felvétel hiányának mértéke az egyes mikroelemeknél más-más. A vizsgált mikroelemek felvehetősége szempontjából a következő sorrendet állították fel:

Mo Zn Fe Cu Mn.

Szalay és munkatársai szerint tehát láptalajokon a növények a legkönnyebben a molibdént, legnehezebben pedig a mangánt képesek felvenni.

Szalay és munkatársai előbbiekben kivonatolt vizsgálati eredményeinek jelentősége a gyakorlati mezőgazdaság szempontjából nyilvánvaló. Az észlelt jelenségek magyarázatára azonban több mód is kínálkozik. Legegyszerűbb magyarázat lenne a láptalajok alacsony ásványianyag-, és ezzel párhuzamosan, alacsony mikroelem-tartalma. A nagyszámú talajanalízis azonban azt mutatta, hogy a vizsgált talajok elegendő mennyiségben tartalmazzák a hiányosan felvett mikroelemeket. E talajokon mért magas visszatartási értékek (R. F. értékek) eleve valószínűvé tették, hogy egyes mikroelemeket a növények csak korlátozott mértékben tudnak felvenni. Analíziseik ezeket a feltételezéseket megerősítették.

Foglalkoztak más lehetséges magyarázattal is. A magas Ca-tartalmú oxidált talajokon a Mn felvétele erősen korlátozott. A mangán két vegyértékű alakjában oldható és mozgékony, oxidatív környezetben azonban könnyen három és négy vegyértékűvé oxidálódik, amelyek gyakorlatilag oldhatatlanok és az ásványszemcsék felületén szorbeálódnak. Felmerülhetett tehát a gondolat, hogy a láptalajok magas mésztartalma és a Mn oxidált állapota okozza a mozgékonyság hiányát és ezzel egyidejűleg a nehéz felvehetőséget. A tőzeg szervesanyagának az ATOMKI-ban Szilágyi M. által vizsgált (1971, 1972, 1973) redoxi tulajdonságai alapján a tőzeges láptalajok nem tekinthetők erősen oxidált talajoknak, mert kifejezetten redukáló sajátosságuk van. Régen ismeretes, hogy a tőzeges lápterületeken a talajok szintje alatt szélsőségesen redukáló környezet is jelentkezhet (például kénhidrogén-képződés). Bár a láptalajok kationcserélő kapacitása Ca-mal gyakorlatilag többnyire telített, ez a Ca-tartalom azonban az üledékes ásványi talajokhoz viszonyítottan nem tekinthető kiugróan magasnak (0,5–3,5%).

Más típusú problémát vet fel a cink esete, amelyet a mangánnal és rézzel szemben a növények jól felvesznek annak ellenére, hogy a laboratóriumi mérések a Mn-nal közel egyező, magas visszatartási faktort állapítottak meg a Zn-re is.

A lassú oxidatív degradáció részben lebontja az oldhatatlan, nagy molekulásúlyú huminsavakat kisebb molekulásúlyú, vízben oldódó, kelátképzésre is alkalmas vegyületekké. Szalay szerint éppen ezzel magyarázható, hogy a kelátképzésre hajlamos alacsony molekulásúlyú huminsavak mozgósíthatják a könnyen kelátozható cinket. Így a komplexképzésre hajlamos cink az egyébként erős ionszorpció kötődése ellenére a növények számára mégis általában kielégítő mértékben hozzáférhető. Részben ez vonatkozik Szalay szerint a vasra is, amely szintén könnyen komplexezhető, de a növénynek nagyobb mennyiségben van rá szüksége. Vashiányt csak esetenként észleltek.

A fenti kationokkal ellentétben viszont a mangán kation gyakorlatilag nem képez komplexeket, így összhangban van a Mn magas visszatartási tényezője Szalaynak és munkatársainak azzal a megállapításával, hogy a tőzeges láptalajokon a mangán felvétele a legnehezebb a növények számára.

Magyarázatra szorulnak végül azok a vizsgálati eredmények, amelyek szerint a láptalajokon a növények molibdénfelvétele nem hiányos, hanem éppen ellenkezőleg,



néha túlzottan magas. A molibdén amfoter elem és neutrális közegben anionos formában mozog. A visszatartási tényezőjét nem olyan magasnak mérték, mint a többi mikroelemét, mindössze néhány száz,  $\text{pH}=4$  körüli értéknél. Ez elegendő arra, hogy bizonyos fokig a savanyú tőzeg is gyűjtsön Mo-t. A legtöbb hazai láptalaj azonban gyengén lúgos kémhatású, és ilyen esetben a molibdén amúgy sem túl magas visszatartási tényezője csökken, tehát szabadon hozzáférhető a növények számára.

Tekintettel arra, hogy a láptalajokon élő növények hiányos mikroelem-felvétele egyfelől a növény optimális fejlődése és terméshozama szempontjából, másfelől — takarmánynövények esetén — az ezt fogyasztó állatok mikroelem-táplálkozása szempontjából kifejezetten előnytelen, Szalay és munkatársai sokoldalú kísérleteket folytattak arra vonatkozóan is, hogyan lehetne a növények számára kívánatos mikroelem-kiegészítést biztosítani.

A legkézenfekvőbb megoldás az alapműtrágyával együtt a talajba adagolni a szükséges mennyiségben a mikroelemeket. Nagyszámú kísérleteikből azt a következtetést vonták le, hogy jól definiálható, szignifikáns különbség nem mutatkozott a talajhoz adott mikroelemmel kezelt növéyminták és a kezeletlen kontrollminták mikroelem-tartalma között. Ez a megállapítás jó összhangban van a már részletesen ismertett ionszorpciós laboratóriumi kísérletek eredményeivel. A magas huminsavtartalmú láptalajok tehát a talajba juttatott mikroelemeket éppen úgy erős szorpciós kötéssel képesek megkötni, mint a talaj eredeti mikroelem-tartalmát. Ilyen módon a növények számára a többlet mikroelem-mennyiség csaknem kihasználatlan, a helyzetet alig képes javítani.

Szalay és munkatársai behatóan tanulmányozták a növények levélzetén keresztül, a permetezés útján való mikroelem-ellátás lehetőségét és optimális feltételeit. Több évig tartó és nagyszámú ellenőrző analízisre támaszkodó kísérleteik eredményeképpen kidolgoztak egy olyan Mn-, Cu- és Fe-tartalmú permetező szert, amelynek alkalmazásával a kísérleti növények mikroelem-felvételét a kívánatos, optimális nívóra lehetett emelni és a terméshozam 15—25%-kal emelkedett. Szalay és Sámsoni az általuk kidolgozott mikroelem-permetező szerre eddig Magyarországon és az USA-ban kaptak szabadalmi oltalmat.

A lápterületek okszerű hasznosítása népgazdasági érdek. Bár hazánkban egyéb országokhoz viszonyítva kisebb a kiterjedésük, értékes tulajdonságaik mégis indokolják a hasznosítást. Vízrendezéssel értékes termőtalajjá alakíthatók, kitermelve fontos ipari alapanyagot szolgáltatnak.

Szalay munkatársaival e területen a tudományos alap kutatásokon túlmenően konkrét gazdasági eredményeket is magában foglalót alkotott.

Szalay agrártudományi érdeklődése ezután a Debrecen szomszédságában elterülő Hortobágy felé fordult. Közismert tény, hogy a Hortobágy nagy kiterjedésű szikes területei rossz termőképességűek. A nagy sótartalmú, tömör szerkezetű, rossz vízgazdálkodású és magas pH-jú talajokon élő növényzet gyenge fejlettségű, alacsony terméshozamú. Szalay 1975-ben vetette fel a kérdést, hogy vajon a hortobágyi szikes területeken élő növényzet kielégítő fejlődését csak a rossz talajadottságok okozzák, vagy esetleg — éppen ennek következményeképpen — szerepe lehet esetleg egy feltételezett mikroelemhiánynak is. Ennek alapján 1975 tavaszán Szalay és kutatócsoportja elkezdtek egy széles körű felmérést a Hortobágyon, mely részben talajanalízisekből állt, nagyobb részben nagyszámú növényanalízist foglalt magában. [126, 129].

Vizsgálataik azt mutatták, hogy a Hortobágy növénytakarójának nagy részén kisebb-nagyobb fokú mikroelemhiány lép fel elsősorban Zn-ből és Cu-ból. Ez a hi-



ány legnagyobb mértékű a magasabb osztályú (III—IV. oszt.) szikes területeken, de észlelhető a jobb minőségű (I—II. oszt.) szikeken is. A vizsgált 19 növénycsalád közül a legfontosabb, Poaceae családhoz tartozó növények átlagos Zn-tartalmát 14 ppm-ben, Cu-tartalmát pedig 2,8 ppm-ben állapították meg. Ugyancsak nagyon alacsonynak adódott a Cyperaceae család átlagos Zn- és Cu-tartalma (17, illetve 5,5 ppm) is. Mindez annak ellenére áll fenn, hogy a talajanalízisek szerint a hortobágyi talajok kielégítő mértékben el vannak látva valamennyi mikroelemmel. A szikes talajok jellegzetes hátrányos adottságaiban: nagy  $\text{Na}^+$ -tartalom lúgos kémhatás ( $\text{pH}=7,5\text{--}9$ ), rossz vízgazdálkodás — látják Szalay és munkatársai a növények mikroelem-felvételének nehézségeit.

A hiányos mikroelem-felvétel azonban nemcsak a hortobágyi növényzet jó fejlődésének egyik gátló tényezője, hanem az itteni állatállomány, főleg a több tízezer juh szempontjából is figyelmet érdemlő hátrányos tényező. Az itteni legelőkön tartott juhállománynál például a már régóta ismeretes alacsony szaporodási index egyik jele lehet a nem kielégítő mikroelem-ellátásnak. Szalay és munkatársai a Hortobágy szikes területein több irányú kísérletet folytatnak a növényzet hiányos mikroelem-felvételének pótlása útján a növénytermelési és állattenyésztési hozamok mutatóinak javítása érdekében.

### Összefoglalás

Ennyiben ismertettük Szalay Sándor akadémikus agronómiai vonatkozású tudományos munkásságát és tevékenységét. Amint látjuk, valóban talált olyan marginális területeket, melyeken a tudományos együttműködés mindkét érintett tudományág területén — urán-geokémia, valamint az agrokémia — szép eredményekre vezetett alakutatósi és gyakorlati vonatkozásokban egyaránt.

Napjainkban tanúi vagyunk annak, hogy nagyfokban szakosodott, differenciálódott tudományos területek együtt keresik a további hasznos együttműködés alapját. Az itt említett szakterületeken eddig elért eredmények nagyon biztatók és további lehetőségeket ígérnek.

A nyomelemkutatásnak nagy jövője áll előttünk, ami egyrészt a geokémia, másrészt a mezőgazdasági kémia vonatkozásában sok kérdést fog még felvetni. A téma vizsgálata ezért mindkét tudományterület alap- és gyakorlati kutatásában egyaránt kívánatos. Szalay Sándor ezen munkálkodásában is bizonyította sokoldalú tudományos felkészültségét és lényegérzékét. Az elméleti kutatáson túlmenőleg gondja volt és ma is az, hogy vizsgálja a kutatási eredmények gyakorlati alkalmazhatóságának nem könnyű feladatát.

A megkezdett és folyamatban levő tudományos kutatás további folytatása kívánatos a Szalay Sándor akadémikus kijelölte úton. Az elért eredmények sokoldalú alkalmazása az utánunk következő generációk feladata.

Szalay Sándor ebben a vonatkozásban is nagyot alkotott. Munkahelyén tudományos iskolát alakított ki. Van tehát kinek átadnia a „staféta botot”. Ebben nagy erő rejlik és nagymértékben biztosítja az általa feltárt területeken folytatható további tudományos kutatómunkát.

Ezen gondolatok jegyében őszinte tisztelettel köszöntjük Szalay akadémikust 70. születésnapja alkalmával, kívánva Neki a továbbiakban is jó munkálkodást mind szűkebb tudományterülete, mind az egész magyar tudomány érdekében.



## HIVATKOZOTT IRODALOM

A számmal jelzett hivatkozások Szalay Sándor tudományos munkáinak e füzet végén található jegyzékére utalnak.

- László G.: A Balaton melléki tőzeglápok és berkek. — A Balaton tudományos tanulmányozásának eredményei. I. köt. 1. rész. Budapest 1913.
- Dorner B.: A Balaton menti tőzegtelepek hasznosítása. — Mezőgazdasági Szemle 34, (1—2.) 54, 1916.
- Fáber S.: Összehasonlító kísérletek tőzeges réten különböző műtrágyákkal. — Köztelek 37, 715—943, 1927.
- Glaser G.: A lápgazdálkodás. Köztelek 39. 1580. 1929.
- Kenessey B.: Láplecscapolás és lápkultúra. — Mezőgazdasági Közl. 15, 24, 1929.
- Gyárfás G.: Műtrágyázási kísérletek tőzeges réten. — Köztelek. 53, 1554, 1943.
- Belák S.: A balatoni tőzeglápok hasznosítása. Mezőgazd. Kísérli. Int. Növényterm. Oszt. Jelentése, Keszthely, 1952.
- Kemenes E.: Lápok mezőgazdasági hasznosítása. — Mezőgazd. Kísérli. Int. évi jelentése. Keszthely, 1954.
- Tóth A.: Termesztési kísérletek eredménye a Balaton környéki lápterületen. — DNy-Dunántúli Mezőgazd. Kísérli. Int. évi jelentése, Keszthely, 1956.
- Belák S.: Balaton környéki láptalajok tulajdonsága, vízrendezése és mezőgazdasági hasznosítása. Kandidátusi értekezés. Keszthely 1955.
- Belák S.: Balaton környéki lápok vízrendezése és mezőgazdasági hasznosítása. DNy-Dunántúli Mezőgazd. Kísérleti Int. évi jelentése, Keszthely, 1958.
- Kemenes E.: Richtlinien zu einigen Organisationsproblemen der Moorbewirtschaftung. Kézirat, 1959.
- Tóth A.: Balaton körüli lápterületek tápanyag-gazdálkodása. Kísérletek évi jelentése, Agrártud. Főisk. Közl. Keszthely 1960.
- Tóth A.: Trágyázási kérdések tanulmányozása hazai síklápjainkon. — Keszthelyi Mezőgazd. Akadémia Kiadv. 1961.
- Tóth A.: Wirkung der Mikroelemente auf die Niedermoor am Plattensee. — Mezsdunarodnoj Torfkongresz. Leningrad 1962.
- Voisin A.: Einfluss des Bodens auf die Fruchtbarkeit des Tieres. Kézirat, 1964.
- Tölgyesi Gy.—Mócsi J.: A hazai szálastakarmányok mikroelem-tartalma. — Magyar Állatorvosok Lapja 15. 44—47, 1960.
- Győri D.: Néhány talajtípus mikroelemkészlete. — Agrokémia és Talajtan 7, 97, 1958.
- Tóth A.—Szabó F.: Mikroelemkísérletek eredményei a kisbalatoni síklápon. — Kísérli. Közl. 52/A (3.), 47—53, 1959.
- Győri D.: The trace element conditions of some moor areas in Hungary. — Acta Agron. Hung. 19, 87—94, 1967.
- Tölgyesi Gy.: Adatok a réteken előforduló négy gyakoribb növénycsalád mikroelemtartalmáról. — Magyar Állatorvosok Lapja 18, 207—209, 1963.
- Tölgyesi Gy.: A keszthelyi lápon termelt szálastakarmányok réz és molibdén tartalmának takarmányozási vonatkozásai. — Magyar Állatorvosok Lapja, 20, 502—506, 1965.
- Tölgyesi Gy.: Applicability of newest knowledge on the microelement content of plants in different fields of agricultural sciences. — Acta Agron. Hung. 13, 287—301, 1965.
- Tölgyesi Gy.—Haraszti E.: Tapasztalatok legelő mikroelem-trágyázása során. — Növénytermelés 16, 7—14, 1967.
- Pejve A. V.: Biohimija pocsv. — Szel'hozgiz. Moszkva, 1961.
- Tóth A.: A mikroelemek felvételének tanulmányozása a keszthelyi rétlápon I. — Agrokémia és Talajtan, 18, 263—288, 1969.
- Robinson W. V.—Dever R. F.: Composition of soils, peats and plants associated with cattle malnutrition. — Soil Science 82, 275—285, 1956.
- Horváth Z.—Nacsev B.: Takarmánytartalmak, hiánybetegségek. — Mezőgazdasági Kiadó Budapest. 1972. 123. old.
- Szilágyi M.: Tőzeg—víz heterogén rendszer redoxi tulajdonságai és normál potenciáljának meghatározása. — Magyar Kémiai Folyóirat 77, 172—175, 1971.
- Szilágyi M.: Humuszsavak helye az organikus reverzibilis redoxirendszerek sorában. ATOMKI Közlemények 14, 265—272, 1972.
- M. Szilágyi: The redox properties and the determination of the normal potential of the peat-water system. — Soil Science 115, 434—437, 1973.



# SZALAY SÁNDOR

## TUDOMÁNYOS MUNKÁINAK JEGYZÉKE

1. Gázkeverékek dielektromos viselkedése. Egyetemi doktori értekezés. Bp., 1932.
2. Die Zerstörung von hochpolymeren Molekülen mittels Ultraschallwellen. Z. Physik Chem., Abt. A, 164, 234, 1933.
3. Intensitätsbestimmungen zur Erklärung der depolymerisierenden Wirkung der Ultraschallwellen, Physik. Z., 35, 293, 1934.
4. Kompressibilität verdünnter Elektrolytlösungen, Physik. Z., 35, 639, 1934.
5. Die Einwirkung von ultravioletem Licht auf Saccharose- und Glukoselösungen. Magyar Biológiai Kutató Intézet II. Oszt. Munkái, 8, 417, 1935—36.
6. The Formation of Radio-Aluminium ( $\text{Al}^{28}$ ) and the Resonance Effect of  $\text{Mg}^{25}$ . W. Y. Chang társszerzővel. Proc. Roy. Soc. (London), Ser. A., 159, 72, 1937.
7. Fine Structure of the Yield-Curve of the Transmutation of Aluminium. Nature, 141, 972, 1938.
8. Die Anregungsfunktionen der Umwandlungen  $^{13}\text{Al}^{27}(\alpha, n)$   $^{15}\text{P}^{30}$  und  $^{15}\text{B}^{10}(\alpha, n)$   $^{14}\text{N}^{14}$ . Z. Physik, 112, 29, 1939.
9. Megfigyelések a  $^{15}\text{P}^{31}$  és  $^{14}\text{N}^{14}$  atommagok gerjesztett állapotain. Matematikai és Természettudományi Értesítő, 58, 313, 1939.
10. Die Anregungskurve der Gamma-Strahlung die durch Beschiessen von  $\text{Be}^9$ ,  $\text{B}^{10,11}$  und  $\text{Al}^{27}$ -Kerne mit Po-Alpha-Teilchen erregt wird. J. Zimonyi társszerzővel. Z. Physik, 115, 639, 1940.
11. Über die in Mg durch Po-Alpha-Teilchen erregten Gamma-Strahlung. Die Naturwissenschaften, 28, 667, 1940.
12. Vizsgálatok néhány könnyű atommagnak a polónium-alfa-sugaraival történő bombázását kísérő gamma-sugárzásról. Zimonyi Gy. társszerzővel. Matematikai és Természettudományi Értesítő, 60, 129, 1941.
13. Ein Differentialmikrokolorimeter für biologische Untersuchungen. A. V. Jeney társszerzővel. Z. für Immunitätsforschung, 104, 474, 1941.
14. Beiträge zur Anregungsfunktion der Kernumwandlung  $\text{Mg}^{25}(\alpha, p)$   $\text{Al}^{28}$  und die experimentelle Bestimmung des  $\text{Mg}^{25}$ -Kernradius. Die Naturwissenschaften, 32, 72, 1944.
15. Contributions to the Nuclear Processes Induced in Magnesium by Polonium Alpha Particles. Csongor É. társszerzővel. Phys. Rev., 74, 1063, 1948.
16. Kutatások urán és thorium magyarországi előfordulása után, korszerű atomfizikai módszerekkel. Magyar Állami Földtani Int. évi jelentése, Beszámoló a vitákról, 10, 5, 1948.
17. Thorium and Uranium Content of the Velence Mountains, Hungary. Nature, 162, 454, 1948.
18. Investigations into the Thorium and Uranium Contents of the Eruptive Rocks in Hungary by Means of Geiger—Müller Counter-Tubes. Magyar Állami Földtani Int. évi jelentése, Beszámoló a vitákról, 10, 23, 1948.
19. Determination of Radioactive Content of Rocks by Means of Geiger—Müller Counters. Csongor É. társszerzővel, Science, 109, 146, 1949.
20. Kőzetek radiológiai vizsgálata. Földvári A. társszerzővel. MTA Mat. és Term. Tud. Oszt. Közl., 1, 60, 1951.
21. Quantitativ histokémiai phosphatase-meghatározás radioaktív ólom felhasználásával. Barka T., Pósalaki Z. Kertész L. társszerzőkkel. Kísérletes Orvostudomány, 3, 1, 1951.
22. Criticism on Gömöri's Phosphatase Reaction, Relying upon Study with Aid of Tracers. Pósalaki Z. társszerzővel. Acta Morphologica Hung., 1, 432, 1950.
23. Quantitativer Ausbau histochemischer Reaktionen mit isotopen Metallen. Barka T., Pósalaki Z., Kertész L. társszerzőkkel. Acta Physiologica Hung., 1, Suppl. 56, 1951.
24. Egy elektromágneses rendszerű alfa-sugár spektrométer. Fényes T. társszerzővel. Fiz. Szemle, 2, 98, 1952.



25. Radioaktív izotóppal nyomjelzett intravénásan beadott kolloid sorsának vizsgálata állati szervezetben. Kertész L., Simonyi Á. társszerzőkkel. Fizikai Szemle, 2, 96, 1952.
26. Hazai kőszén radiológiai vizsgálata. MTA Műszaki Tud. Oszt. Közl., 5, 167, 1952.
27. Quantitative Histochemical Determination of Phosphatase by Means of Radioactive Lead. Barka T., Pósalaki Z., Kertész L. társszerzőkkel. Acta Anatomica, 16, 45, 1952.
28. The Enrichment of Uranium in Some Brown Coals in Hungary. Acta Geol. Hung., 2, 299, 1954.
29. Vizsgálatok nagy atomsúlyú kationok adszorpciójára humusz kolloidokon. MTA III. (Mat. és Fiz.) Oszt. Közl., 4, 327, 1954.
30. Studies on Experimental Lead Poisoning III. The Effects of Alcohol in Acute Lead Poisoning. Keszttyűs L., Kocsár L., Kertész L., Vályi-Nagy T. társszerzőkkel. Acta Physiologica Hung., 5, 543, 1954.
31. Untersuchungen über den zeitlichen Ablauf des Verschwindens des Intravenös verabreichten und mit radioaktiven Isotop markierten  $\text{Bi}_2\text{S}_3$ -Kolloids. Kertész L. társszerzővel. Acta Physiologica Hung., 6, Suppl., 128, 1954.
32. Können sich spezifische Antikörper auf die Wirkung sekundenlang dauernder Antikörperreize bilden? Kocsár L., Salánki J., Kertész L. és Keszttyűs L. társszerzőkkel. Acta Physiologica Hung., 5, Suppl. 55, 1954.
33. Nervensystem und Immunität II. Können sich unter sekundenlanger Einwirkung von Antigenreizen spezifische Abwehrstoffe bilden? Keszttyűs L., Kocsár L., Kertész L., Salánki J. társszerzőkkel. Acta Microbiol. Hung., 1, 371, 1954.
34. Idegrendszer és immunitás II. Képződhetnek-e specifikus ellenanyagok másodpercekig tartó antigénreizek hatására? Keszttyűs L., Kocsár L., Kertész L., Salánki J. társszerzőkkel. Kísérletes Orvostudomány, 6, 393, 1954.
35. Unusual Radioactivity Observed in the Atmospheric Precipitation in Debrecen (Hungary) between Apr. 22—Dec. 31. 1952. Id. Berényi D. társszerzővel. Acta Physica Hung., 5, 1, 1955.
36. Szokatlan radioaktivitás megfigyelése a Debrecenben 1952. ápr. 22—dec. 31. között leesett csapadékokban. Id. Berényi D. társszerzővel. MTA III. (Mat. és Fiz.) Oszt. Közl., 5, 89, 1955.
37. Vizsgálatok a kryptonnak levegőből üzemi kinyerése alkalmával fedűsülő radioaktív szennyeződésére vonatkozólag. Dézsi Z., Horváth M. társszerzőkkel. Magy. Fiz. Foly. 3, 279, 1955.
38. Analitikai vizsgálatok hazai kőszének urántartalmára vonatkozólag. Almássy Gy. társszerzővel. MTA Kémiai Tud. Oszt. Közl., 8, 33, 1956.
39. Analitikai vizsgálatok hazai kőszének vanádium- és molibdéntartalmára vonatkozólag. A két fém szénhez kötött állapotának igazolása. Almássy Gy. társszerzővel. MTA Kémiai Tud. Oszt. Közl., 8, 39, 1956.
40. Geiger—Müller-csőves sugármérő berendezés. Makranczi B., Nagy J. társszerzőkkel. Mérés és Automatika, 4, 300, 1956.
41. Jelentés az ajkai medence kőszénének urántartalmáról. ATOMKI, Debrecen, 1956. Lovas I., Pesty L., Almássy Gy. társszerzőkkel. A Magyar Földtani Intézet Dokumentációs Tárában.
42. Jelentés a tatabányai medence kőszénének urántartalmáról. ATOMKI, Debrecen, 1956. Lovas I., Pesty L., Almássy Gy., Kovács Á. társszerzőkkel. A Magyar Földtani Intézet Dokumentációs Tárában.
43. Jelentés a mecseki liász kőszén urántartalmáról. ATOMKI, Debrecen, 1956. Pesty L., Lovas I., Almássy Gy. társszerzőkkel. A Magyar Földtani Intézet Dokumentációs tárában.
44. Jelentés a Kisgyóni-medence kőszénének urántartalmáról. ATOMKI, Debrecen, 1956. Lovas I., Pesty L., Almássy Gy. társszerzőkkel. A Magyar Földtani Intézet Dokumentációs Tárában.
45. Szénhamuk radioaktivitásának vizsgálata fotoemulziós módszerrel. Bujdosó E., Medveczky L. társszerzőkkel. MTA III. (Mat. és Fiz.) Oszt. Közl., 7, 129, 1957.
46. Investigation of the Uranium Content of Coal Ashes with Nuclear Emulsion. Bujdosó E., Medveczky L. társszerzőkkel. Acta Phys. Hung., 8, 195, 1957.
47. Precíziós automatizált expanziós ködkamra. Csikai Gy., Hrehuss Gy. társszerzőkkel. MTA III. (Mat. és Fiz.) Oszt. Közl., 7, 137, 1957.
48. Fluoriméter uránium kvantitatív meghatározásához. Máthé Gy. társszerzővel. Magy. Fiz. Foly., 5, 247, 1957.
49. The Role of Humus in the Geochemical Enrichment of U in Coal and Other Bioliths. Acta Phys. Hung., 8, 25, 1957.
50. Beiträge zum Wirkungsmechanismus des Kobalt-Ion-Adrenalin-Antagonismus. Kocsár L., Újhelyi Cs., Keszttyűs L. társszerzőkkel. Acta Physiologica Hung., 11, 415, 1957.
51. Számítások a szabályozott, fúziós atomenergia-termelés nehézségeire vonatkozólag. Berényi D. társszerzővel. MTA III. (Mat. és Fiz.) Oszt. Közl., 8, 345, 1958.



52. Beta spektrometr toroidal'no-szekternogo tipa. Berényi D. társszerzővel. Izv. Akad. Nauk SzSzSzR. Szerija Fiziceszkaja, 22, 877, 1958.
53. Effekt otbaci nejtrino v beta-raszpade He<sup>6</sup>. Csikai Gy. társszerzővel. Zs. Ekszp. i. Teor. Fiz., 35, 1072, 1958.
54. The Recoil Effect of the Neutrino in the Beta-Decay of He<sup>6</sup>. Csikai Gy. társszerzővel. International Conference on Mesons and Recently Discovered Particles. 43<sup>o</sup> Congresso Nazionale di Fisica, Padova-Venezia, 22—28. Settembre 1957. p. IV. 8. Societa Italiana di Fisica, Padova.
55. The Significance of Humus in the Geochemical Enrichment of Uranium. Peaceful Uses of Atomic Energy. Proceedings of the II. International Conference Geneva, September 1958. Vol. 2. p. 182. Geneva, United Nations.
56. The Electron Neutrino Angular Correlation in the Decay of He<sup>6</sup>. Proceedings of the International Conference on Nuclear Physics, Low Energy Nuclear Interactions and Nuclear Structure, Paris. July, 1958. p. 840. London. 1959. Crosby Lookwood and Son, Ltd. Csikai Gy. társszerzővel.
57. Some Remarks on the Generation of Nuclear Power by Controlled Fusion Processes. Berényi D. társszerzővel. Acta Phys. Hung., 10, 39, 1959.
58. A Beta-Ray Spectrometer of Toroid-Sector Type. Berényi D. társszerzővel. Acta Phys. Hung., 10, 57, 1959.
59. Hasadási termékek a légköri csapadékban Debrecenben 1952 és 1957 között. Id. Berényi D. társszerzővel. MTA III. (Mat. és Fiz.) Oszt. Közl., 9, 175, 1959.
60. Fission Product Precipitation from the Atmosphere in Debrecen, Hungary, between 1952 and 1957. Peaceful Uses of Atomic Energy. Proceedings of the II. International Conference Geneva, Sept. 1958. Vol. 18 p. 570. Geneva, United Nations. Id. Berényi D. társszerzővel.
61. Átáramoltató betét folyadékok radioaktivitásának mérésére GM-számlálósőhöz. Szilágyi M. társszerzővel. Magy. Fiz. Foly. 7, 419, 1959.
62. Magyarország egyes fontosabb községi területeinek átvizsgálása uránium nyomelődéséről szempontjából. Almásy Gy., Pesty L., Lovas I. társszerzőkkel. ATOMKI Közl., 1, 7, 1959.
63. Kísérleti atombomba-robbantások időpontjának meghatározása a légkör radioaktivitásának alapján. Kovács Á. társszerzővel. ATOMKI Közl., 2, 229, 1960.
64. A magfizikai ipar szennyező hatása vízkészletünkre. Hidrológiai Közöny, 40, 293, 1960.
65. Radioaktív anyagok a légkörben és természetes vizekben. Fizikai Szemle, 10, 101, 1960.
66. Kétfélmillió volt névleges feszültségű Van de Graaff generátor. Puskás E., Koltay E. és Félserfalvi J. társszerzőkkel. ATOMKI Közl., 2, 3, 1960.
67. Az Eperjes—Tokaji-hegység és előtere vizeinek urán-nyomtartalmáról. Scherf E. társszerzővel. ATOMKI Közl., 2, 71, 1960.
68. Laboratóriumi kísérletek az uránnak szénhamuban történő elődúsítására. Angeli I. társszerzővel. ATOMKI Közl., 2, 145, 1960.
69. Investigations Concerning the Retention of Fission Products on Humic Acids. Szilágyi M. társszerzővel. Acta Physica Hung., 13, 421, 1961.
70. Critical Comments on the Investigation of the Electron-Neutrino Angular Correlation by the Cloud Chamber Method. Csikai J., Bacsó J. társszerzőkkel. Acta Phys. Hung., 13, 437, 1961.
71. Fission Product Precipitation from the Atmosphere in Debrecen, Hungary, between 1958 and 1960. Kovács Á. társszerzővel. Acta Phys. Hung., 13, 281, 1961.
72. Vizsgálatok egyes uránhasadási termékek adszorpciójára humusz preparátumon. Szilágyi M. társszerzővel. MTA III. (Mat. és Fiz.) Oszt. Közl., 11, 47, 1961.
73. Vizsgálatok Kelet-Magyarország vizeinek radioaktivitásáról. Acta Universitatis Debreceniensis de L. Kossuth Nominatae, 7, 45, 1961.
74. Atommaghasadási termékek megkötése humuszsavakon és a jelenség alkalmazási lehetősége az atomiparban. ATOMKI Közl., 5, 3, 1963.
75. A humuszsavak szerepe az uránium geokémiájában és lehetséges szerepük más kationok geokémiájában. MTA III. (Mat. és Fiz.) Oszt. Közl., 13, 253, 1963.
76. Cation exchange properties of humic acids and their importance in the geochemical enrichment of (UO<sub>2</sub>)<sup>++</sup> and other cations. Preprints. Debrecen, 1963. MTA Atommag Kutató Intézete, 11 p. Geochimica et Cosmochimica Acta, 28, 1605, 1964.
77. Rol gumuszovüh kiszlot v geohimii urana i ih vozmoznaja rol'v geohimii drugih kationov. Himija zemnoj korü. Trudü geohimiceszköj konferencii poszvjajasnnoj sztoletiju szo dnja rozsdenija akademika V. I. Vernadskogo. Tcm. 2. 1964, Izd.-vo „Nauka”. 428—442.
78. Általános alapelvek egy tankrendszerü Van de Graaff generátor tervezéséhez. Koltay E. társszerzővel. ATOMKI Közl., 6, 3, 1964.



79. Fission Product Precipitation from the Atmosphere in Debrecen, Hungary, during 1961 and 1962. Kovách Á. társszerzővel. *Acta Physica Hung.*, 16, 321, 1964.
80. Preparation of Thin Silicon Targets by Reductive Evaporation. Berecz I., Károlyi J. társszerzőkkel. *Nuclear Instruments and Methods*, 33, 364, 1965.
81. Observation of  $(n, \text{He}^3)$  Reaction. Csikai J. társszerzővel. *Nuclear Physics*, 68, 546, 1965.
82. Preparation of Self-Supporting Thin Silicon Targets by Reductive Evaporation. Károlyi J. társszerzővel. *Nuclear Instruments and Methods*, 36, 353, 1965.
83. Hasadási termékek visszatartása tőzeg humuszsavakkal, új lehetőség a szennyvizek kezelésére. Szilágyi M. társszerzővel. *Fizikai Szemle*, 14, 388, 1964.
84. Retention of Fission Products by Peat Humic Acids, a New Possibility in Waste Water Treatment. 3<sup>rd</sup> United Nations International Conference on the Peaceful Uses of Atomic Energy. Preprint. A. (Conf. 28)P(784). Szilágyi M. társszerzővel. *Proc. Conf. Peaceful Uses of Atomic Energy*. Vol. 14., New York, 1965. United Nations. p. 361.
85. Modell-vizsgálatok nyomásgenerátorok elektromos terével kapcsolatban. Kiss Á., Koltay E. társszerzőkkel. *ATOMKI Közl.*, 8, 101, 1966.
86. Investigations on the Leaching of Uranium from Crushed Magmatic Rocks, Preprint, Debrecen, 1966. *ATOMKI Közl.* 14. p. Sámsoni Z. társszerzővel.
87. The Association of Vanadium with Humic. Acids. Preprint. Debrecen, 1966., *ATOMKI Közl.* 7 p. Szilágyi M. társszerzővel. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 31, 1, 1967.
88. Electrode System of Improved Stress Uniformity for Pressurized Van de Graaff Generators. Kiss Á., Koltay E. társszerzőkkel. *Nuclear Instruments and Methods*, 46, 130, 1967.
89. Fission Product Precipitation from the Atmosphere in Debrecen, Hungary, between 1963 and 1965. Kovách Á. társszerzővel. *Acta Physica Hung.*, 23, 137, 1967.
90. Uránium kioldódásának vizsgálata magmás kőzetek zúzalékából. Sámsoni Z. társszerzővel. *Földtani Közlöny*, 97, 60, 1967.
91. Preparation of Separated Mg Isotope Targets by Reductive Evaporation. Somorjai E. társszerzővel. *Nuclear Instruments and Methods*, 49, 355, 1967.
92. Laboratory Experiments on the Retention of Micronutrients by Peat Humic Acids. Preprint, Debrecen, 1967. Institute of Nuclear Research of the Hung. Acad. of Sci. 5 p. Plant and Soil, 29, 219, 1968.
93. Mérések  $\text{Ge}(\text{Li})$  detektorral a  $^{145}\text{Sm}$  bomlási sémáján. Uchrin J., Varga D., Berényi D., Molnár F. társszerzőkkel. *ATOMKI Közl.*, 9, 261, 1967.
94. Nyomtápelemek szorpciója tőzeghumuszsavakon és jelentősége a gyakorlati mezőgazdaságban. Szilágyi M. társszerzővel. *Agrártudományi Közlemények*, 27, 109, 1968.
95. Improvement of the Resolution and Transmission of a Toroid-Sector Type Beta Spectrometer. Varga D., Budai I., Varga L. és Berényi D. társszerzőkkel. *J. Scientific Instruments*. (J. of Physics E.) Ser. 2., 1, 364, 1968.
96. Observation and Cross Section of the Reaction  $\text{Zn}^{64}(n, t)\text{Cu}^{62}$ . Csikai Gy., Jost K. társszerzőkkel. *Acta. Phys. Hung.*, 24, 199, 1968.
97. Precipitation of Fission Products from the Atmosphere in Debrecen, Hungary, during 1966 and 1967. Csongor É. társszerzővel. *Acta Phys. Hung.*, 25, 279, 1968.
98. Accumulation of Microelements in Peat Humic Acids and Coal. *Advances in Organic Geochemistry*. 4<sup>th</sup> International Meeting in Organic Geochemistry. Sept. 16—18. 1968. Amsterdam. Szilágyi M. társszerzővel. Oxford, 1969. Pergamon Press. (Internat. Series of Monographs in Earth Sciences. Vol. 31.)
99. A mikroelem felvételének tanulmányozása a keszthelyi rétlápon I. Belák S., Győri D., Sámsoni Z., Szilágyi M., Tóth A. társszerzőkkel. *Agrokémia és Talajtan*, 18, 263, 1969.
100. Accumulation of Uranium and Other Micrometals in Coal and Organic Shales and the Role of Humic Acids in these Geochemical Enrichments. Guest lecture presented at the general meeting of the Royal Swedish Academy of Sciences on the 23. October 1968. *Archiv för Mineralogi och Geologi*, 5, Nr. 3. 23—36, 1969.
101. Mikroelem hiányjelenségek Enying környéki lápterületen. Sámsoni Z. és Szilágyi M. társszerzőkkel. *Agrokémia és Talajtan*, 19, 1, 1970.
102. Összehasonlító vizsgálatok néhány magyarországi lápterület és ásványi talaj flórájának mikroelem-tartalmáról. Sámsoni Z. és Szilágyi M. társszerzőkkel. *Agrokémia és Talajtan*, 19, 13, 1970.
103. A mikroelem felvételének tanulmányozása a keszthelyi rétlápon II. Belák S., Győri D., Sámsoni Z., Szilágyi M., Tóth A. társszerzőkkel. *Agrokémia és Talajtan*, 19, 27, 1970.
104. A mikroelem felvételének tanulmányozása a keszthelyi rétlápon III. Sámsoni Z., Szilágyi M. társszerzőkkel. *Agrokémia és Talajtan*, 19, 39, 1970.



105. An Electromagnetic Ion Beam Shutter. Dombi I. társszerzővel. *Nuclear Instruments and Methods*, 84, 149, 1970.
106. Fission Products in the Atmospheric Precipitation in Debrecen, Hungary, during 1968 and 1969. Csongor É. társszerzővel. *Acta Phys. Hung.*, 29, 407, 1970.
107. Retention of Micronutrient Cations by Peat Humic Acids and Deficiency of Plants. (Contribution, International Symposium on Hydro- and Biogeochemistry, Sept. 7—12, 1970, Tokyo) *Proceedings of the Symposium*, Vol. II. 1973, 361.
108. Study of the Decay of  $^{145}\text{Sm}$  by Ge(Li) Detector Techniques. Berényi D., Varga D., Molnár F. és Uchir J. társszerzőkkel. *Acta Phys.*, 28, 431, 1970.
109. Az ATOMKI 1 millió voltos Van de Graaff nyomásgenerátora. Bácskay Gy., Berecz I., Bódizs D., Kiss Á., Koltay E., Papp I., Schadek J., Somorjai E., Szabó Gy. társszerzőkkel. *ATOMKI Közl.*, 11, 125, 1969.
110. Néhány láptalajon termelt takarmány nyomtápelem vizsgálata. Sámsoni Z., Szilágyi M. társszerzőkkel. *Agrokémia és Talajtan*, 20, 353, 1971.
111. Mikroelem permetezézés szabad földi kísérlet az Enying környéki láptalajon. Landy L., Sámsoni Z., Szilágyi M. társszerzőkkel. *Agrokémia és Talajtan*, 21, 193, 1972.
112. Investigations on the Leaching of Uranium from Crushed Magmatic Rocks. *Proceedings of Symposium on Hydrogeochemistry and Biogeochemistry*, Sept. 7—9, 1970, Tokyo, Japan, Vol. 1. 1973. pp. 261—272. The Clarke Co., Washington.
113. Neutral Atom Component of High Frequency Ion Source Beam. Bódizs D., Koltay E. társszerzőkkel. *Nuclear Instruments and Methods*, 94, 537, 1971.
114. Line Focused Beam for High Voltage Accelerators. I. Kiss, E. Koltay, E. V. Shpak társszerzőkkel. *Nuclear Instruments and Methods*, 107, 401, 1973.
115. Investigation of the leaching of uranium from crushed magmatic rock. Sámsoni Z. társszerzővel. *Geochemistry International* Vol. 1969. No. 1—2 pp. 613—623.
116. Evidence for the Existence of  $^{198}\text{Ir}$ . S. Uray társszerzővel. *Radiochemical and Radioanalytical Letters*, 14, 135, 1973.
117. Új eredmények a Röntgen-fluoreszcencia analízisben és alkalmazásában. Bacsó J. és Berényi D. társszerzőkkel. *ATOMKI Közl.*, 15, 1, 1973.
118. Radiochemical Identification of  $^{70}\text{Cu}$ . Jost K. társszerzővel. *Radiochemical and Radioanalytical Letters*, 15, 57, 1973.
119. Retention of Micronutrient Cations by Humic Acids and Deficiency of Plants on Peat Soils. „Actes du 6<sup>ème</sup> Congrès International de Geochemie Organique” (Sept. 18—21, 1973, Rueil-Malmaison (Paris) pp. 841—848, 1973, Edition Technip, Paris.
120. Introductory Description of the New Electrostatic Accelerator Laboratory of the ATOMKI. Koltay E. társszerzővel. *ATOMKI Közl.*, 16, 181, 1974.
121. A mikroelemek felvételének tanulmányozása a keszthelyi rétlápon IV. Sámsoni Z., Szilágyi M. és Tóth A. társszerzőkkel. *Agrokémia és Talajtan*, 24, 61, 1975.
122. Mikroelem-kezelési kísérletek néhány magyarországi tőzeges láptalajon. Tóth A., Murányi E.-né, Sámsoni Z. és Szilágyi M. társszerzőkkel. *Agrokémia és Talajtan*, 24, 371, 1975.
123. Magyarországi tőzeges talajok kationszorpció és mikroelem vizsgálata. Sámsoni Z. és Szilágyi M. társszerzőkkel. *Növénytermelés*, 23, 327, 1974.
124. Magyarországi tőzeges talajok növényeinek mikroelem hiányjelenségeiről. Sámsoni Z. és Szilágyi M. társszerzőkkel. *Növénytermelés*, 24, 35, 1975.
125. Mn and Cu Deficiency of Plants as a Characteristic Defect of Lowmoor Peat Soils. Z. Sámsoni, M. Szilágyi társszerzőkkel. *Pflanzenernährung und Bodenkunde*, 138, 447, 1975.
126. A Hortobágy legelőterületeinek mikroelem ellátottsága. Sámsoni Z., Siroky Z., Y. El-Hyatemy társszerzőkkel. *Agrokémia és Talajtan*, 26, 95, 1977.
127. The Voltage Generator of the 5 MV Van de Graaff Accelerator of ATOMKI. A. Kiss, E. Koltay, I. Papp társszerzőkkel. *ATOMKI Közl.*, 18, 1, 1976.
128. Magmatikus kőzetek gázzárványai és a primordiális atmoszféra. *Fizikai Szemle*, 25, 460, 1975.
129. Investigations on the Micronutrient Deficiency of Plants on the Pasture Lands of the Heath of Hortobágy. Z. Sámsoni, Z. Siroky és Y. El-Hyatemy társszerzőkkel. *Acta Agronomica*, 27, 17, 1978.
130. Arzén, ólom és más nehéz fémek felhalmozódása a városi vízvezetékek vas—mangán oxid—hidroxid csapadékában. Bacsó J. és Kiss K. társszerzőkkel. *Hidrológiai Közöny*, No. 1. 22, 1978.
131. Accumulation of Arsenic, Lead and other Heavy Elements in the Iron-Manganese Oxide-Hydroxide Precipitation in the City Pipelines of City Waterworks. J. Bacsó és K. Kiss társszerzőkkel. *The Science of the Total Environment*, 9, 271, 1978.



132. Construction of the Stack Insulators and Acceleration Tube Elements Used in the 5 MV Van de Graaff of ATOMKI. I. Berecz, A. Kiss, E. Koltay, I. Papp, R. Džmuraň társszerzőkkel. Proceedings, 2nd International Conference on Electrostatic Accelerator Technology, (24—27 May, 1977—Strasbourg), *Revue de Physique Appliquée*, 12, 1511, 1977.
133. Rapid Radiochemical Separation of Radiogold From Tl Target and Existence of the Nuclear Reaction  $^{203}\text{Tl}(n, \alpha)^{200\text{m}}\text{Au}$ . Mohamed A. A. Naim társszerzővel. *Radiochemical and Radio-analytical Letters*, 30, 397, 1977.
134. Az atomenergia-termelés sajátos nyersanyag-szükségletei. *Fizikai Szemle*, 27, 330, 1977. és *ATOMKI Közl.*, 19, 235, 1977.
135. Kőzetek gázzárványai és Földünk primordiális atmoszférája. *Magyar Tudomány*, 22, 736, 1977.
136. Gas Insulator Elements of the 5 MV Van de Graaff Accelerator of ATOMKI. I. Berecz, Á. Kiss, E. Koltay, I. Papp társszerzőkkel. *ATOMKI Közl.*, 19, 379, 1977.



## ***A IUPAP hírei***

### **AZ 1978-BAN STOCKHOLMBAN TARTOTT XVI. KÖZGYŰLÉS ÁLTAL MEGVÁLASZTOTT IUPAP TISZTSÉGVISELŐK ÉS A NEMZETKÖZI BIZOTTSÁGOK TISZTSÉGVISELŐI, VALAMINT TAGJAI**

#### **I.U.P.A.P. Executive Committee**

*Tagságának kezdete:*<sup>1</sup>

<i>President:</i>	L. SOSNOWSKI	Poland	1972
<i>Past-Pres:</i>	C. C. BUTLER	UK	1963
<i>1st Vice-President:</i>	K. SIEGBAHN	Sweden	
<i>Vice-Presidents:</i>	A. ABRAGAM	France	1975
	D.A. BROMLEY	USA	1975
	R. KAISCHEW	Bulgaria	1975
	I. IMAI	Japan	
	O. MADELUNG	FRG	
	P. MAZUR	Netherlands	
	Y. A. OSSIPYAN	USSR	
	D. SETTE	Italy	
<i>Secretary-General:</i>	L. KERWIN	Canada	1972
<i>Associate Secretary-General:</i>	J. S. NILSSON	Sweden	1972

#### **C.1: Financial Commission**

L. SOSNOWSKI	Poland	1972
D. A. BROMLEY	USA	1975

#### **C.2 + C.13: Commission on S.U.N. and Atomic Masses**

<i>For Chairman:</i>	L. VILLENA	Spain	1969
<i>For Secretary:</i>	R. C. BARBER	Canada	1972

<sup>1</sup> Ahol az évszám hiányzik, 1978 értendő



*Members:*

K. NAGY	Hungary	1975
H.H. JENSEN	Denmark	1975
T. TAKO	Japan	1975
A. R. VERMA	India	1975
P. DEAN	UK	1975
W. KÜNDIG	Switzerland	1975
J. de BOER	Netherlands	1948
E. R. COHEN	USA	1966
V. I. GOLDANSKY	USSR	1972
P. GIACOMO	France	

*C.3: Commission on Thermodynamics and Statistical Mechanics**For Chairman:*

L. P. GORKOV	USSR	1975
--------------	------	------

*For Secretary:*

P. C. HEMMER	Norway	1972
--------------	--------	------

*Members:*

N. G. van KAMPEN	Netherl.	1975
P. RÉSIBOIS	Belgium	1975
C. J. THOMPSON	Australia	1975
A. CORCIOVEI	Romania	
R. ABE	Japan	
C. DOMB	UK	
C. P. ENZ	Switzerland	
J. P. HANSEN	France	
J. L. LEBOWITZ	USA	
I. BIAYNICKI-BIRULA	Poland	

*C.4: Commission on Cosmic Rays**For Chairman:*

S. MIYAKE	Japan	1975
-----------	-------	------

*For Secretary:*

A. W. WOLFENDALE	UK	1975
------------------	----	------

*Members:*

A. E. CHUDAKOV	USSR	1975
R. R. DANIEL	India	1975
K. PINKAU	FRG	1975
H. REEVES	France	1975
B. BETEV	Bulgaria	
A. G. FENTON	Australia	
M. GALLI	Italy	
P. H. STOKER	S. Africa	
F. B. MacDONALD	USA	
J. DUBINSKY	Czechosl.	



*C.5: Commission on Very Low Temperature Physics**For Chairman:*

D. F. BREWER	UK	1975
--------------	----	------

*For Secretary:*

R. TOURNIER	France	1975
-------------	--------	------

*Members:*

S. NAKAJIMA	Japan	1975
F. SCARAMUZZI	Italy	1975
C. V. H. WILSON	Austl.	1975
R. de B. OUBOTER	Netherl.	
J. P. HARRISON	Canada	
F. D. M. POBELL	FRG	
R. C. RICHARDSON	USA	
R. S. SAFRATA	Czechos.	
Y. V. SHARVIN	USSR	
G. ALBRECHT	GDR	

*C.6: Commission on publications**For Chairman:*

J. HAMILTON	Denmark	1972
-------------	---------	------

*For Secretary:*

F. STENMAN	Finland	
------------	---------	--

*Members:*

J. des CLOIZEAUX	France	1975
I. E. DZYALOSHINSKY	USSR	1975
A. C. van der LEUN	Netherl.	1975
M. HAMERMESH	USA	
W. CZYZ	Poland	
A. ALBERIGI	Italy	
H. LOTSCH	FRG	
V. JANOVEC	Czechos.	
E. FERREIRA	Brazil	
A. HELD	Switzerland	

*C.7: Commission on Acoustics**For Chairman:*

R. T. BEYER	USA	1975
-------------	-----	------

*For Secretary:*

B. L. CLARKSON	UK	1972
----------------	----	------

*Members:*

A. BARONE	Italy	1975
C. G. FANT	Sweden	1975
L. FILIPCZYNSKI	Poland	1975
L. LIAMSHV	USSR	1975
B. S. RAMAKRISHNA	India	1975



*Members:*

H. KUTTRUFF	FRG
R. LEHMANN	France
J. A. ROSE	Australia
K. KIDO	Japan
I. RUDNICK	USA

*C.8: Commission on Semiconductors**For Chairman:*

C. HILSUM	UK	1972
-----------	----	------

*For Secretary:*

R. ENDERLEIN	GDR	1975
--------------	-----	------

*Members:*

C. BENOIT	France	1975
M. L. COHEN	USA	1975
Y. UEMURA	Japan	1975
W. ZAWADZKI	Poland	1975
A. FROVA	Italy	
H. GRIMMEISS	Sweden	
V. S. VAVILOV	USSR	
M. CARDONA	GFR	
R. A. STRADLING	UK	
H. W. PÖTZL	Austria	

*C.9: Commission on Magnetism**For Chairman:*

G. de VRIES	Netherl.	1974
-------------	----------	------

*For Secretary:*

Mrs. M. B. STEARNS	USA	1975
--------------------	-----	------

*Members:*

Z. FRAIT	Czechos.	1975
R. VIJAYARAGHAVAN	India	1975
J. VILLAIN	France	1975
A. S. ARROTT	Canada	
A. S. BOROVIK-ROMANOV	USSR	
R. J. ELLIOT	UK	
Y. ISHIKAWA	Japan	
E. KRÉN	Hungary	
A. R. MACKINTOSH	Denmark	
E. MÜLLER-HARTMANN	FRG	

*C.10: Commission on Solid State Physics**For Chairman:*

P. NOZIÈRES	France	1975
-------------	--------	------



*For Secretary:*

H. EHRENREICH	USA	1972
---------------	-----	------

*Members:*

L. BRU	Spain	1975
T. MATSUBARA	Japan	1975
S. AMELINCKX	Belgium	1975
J. P. CARBOTTE	Canada	1975
J. S. DUGDALE	UK	
Y. A. OSSIPYAN	USSR	
F. SOUZA BARROS	Brazil	
M. TOSI	Italy	
A. ZAWADOWSKI	Hungary	
G. K. WHITE	Australia	1972

*C.11: Commission on Particles and Fields**For Chairman:*

E. L. GOLDWASSER	USA	1972
------------------	-----	------

*For Secretary:*

P. FALK-VAIRANT	Switz.	1975
-----------------	--------	------

*Members:*

M. CONVERSI	Italy	1975
H. HARARI	Israel	1975
F. E. LOW	USA	1975
W. PAUL	FRG	1975
L. SOLOVYOV	USSR	1975
G. H. STAFFORD	UK	1975
A. K. WROBLEWSKI	Poland	1975
L. van HOVE	Belgium	
G. von DARDEL	Sweden	
Y. YAMAGUCHI	Japan	

*C.12: Commission on Nuclear Physics**For Chairman:*

F. AJZENBERG-SELOVE	USA	1972
---------------------	-----	------

*For Secretary:*

T. MAYER-KUCKUK	FRG	1972
-----------------	-----	------

*Members:*

S. T. BELYAEV	USSR	1975
B. M. SPICER	Australia	1975
K. SUGIMOTO	Japan	1975
Z. WILHELMI	Poland	1975
G. A. BARTHOLEMEW	Canada	
S. BJØRNOLM	Denmark	
L. L. GREEN	UK	
T. ERICSON	Sweden	
I. TALMI	Israel	
J. YOCCOZ	France	



*C. 14: Commission on Physics Education**For Chairman:*

A. P. FRENCH	USA	1972
--------------	-----	------

*For Secretary:*

P. J. KENNEDY	UK	
---------------	----	--

*Members:*

Y. KAKIUCHI	Japan	1975
A. LORIA	Italy	1975
P. MARIENS	Belgium	1975
G. MARX	Hungary	1975
M. MOKHTAR	Egypt	1975
E. HAMBURGER	Brazil	
B. RONNE	Sweden	1975
R. SEXL	Austria	
G. A. MESYATS	USSR	
C. H. KIM	S. Korea	

*C. 15: Commission on Atomic and Molecular Physics and Spectroscopy**For Chairman:*

A. L. SCHAWLOW	USA	1975
----------------	-----	------

*For Secretary:*

C. NORDLING	Sweden	1975
-------------	--------	------

*Members:*

Y. KANEKO	Japan	1975
J. KISTEMAKER	Netherl.	1975
L. KRAUSE	Canada	1975
H. PFEIFFER	GDR	1975
P. K. CARROLL	Ireland	
M. KUREPA	Yugoslavia	
H. WALTHER	FRG	
E. WEIGOLD	Australia	
B. CAGNAC	France	
B. B. AFROSIMOV	USSR	

*C. 16: Commission on Plasma Physics**For Chairman:*

M. B. GOTTLIEB	USA	1972
----------------	-----	------

*For Secretary:*

H. WILHELMSSON	Sweden	1975
----------------	--------	------

*Members:*

P. K. KAW	India	1975
K. NISHIKAWA	Japan	1975
A. RUTSCHER	GDR	1975
P. VANDENPLAS	Belgium	1975
B. B. KADOMTSEV	USSR	



*Members:*

R. N. FRANKLIN	UK
I. IOVA	Romania
B. S. LILEY	N. Zealand
M. TAILLET	France
L. ENRIQUES	Italy

*C. 17: Commission on Quantum Electronics**For Chairman:*

B. LAX	USA	1975
--------	-----	------

*For Secretary:*

K. JUNGE	GDR	1975
----------	-----	------

*Members:*

D. J. BRADLEY	UK	1975
K. HAMAL	Czechos.	1975
A. PIEKARA	Poland	1975
A. M. PROKHOROV	USSR	1975
K. SHIMODA	Japan	1975
A. G. ALCOCK	Canada	
F. T. ARECCHI	Italy	
K. L. KOMPA	FRG	
M. DUCUING	France	
D. F. WALLS	N. Zealand	

*AC2: International Commission on General Relativity and Gravitation.**IUPAP Delegates:*

V. L. GINZBURG	USSR
A. TRAUTMAN	Poland
Y. CHOQUET—BRUHAT	France
A. KOMAR	USA

## IUPAP konferenciák 1979-ben

C3	COMMISSION ON THERMODYNAMICS AND STATISTICAL MECHANICS				
C3.1	Dynamical Critical Phenomena.	Genève SWITZERLAND	April 2—6	"C"	Prof. Charles P. Enz Dept. de Physique théorique, Quai Ernest Ansermet 24, CH-1211 Genève 4, Switzerland.
C4	COMMISSION ON COSMIC RAYS				
C4.1	16th International Cosmic Ray Conference.	Kyoto JAPAN	August 6—18	"A"	Prof. S. Miyake Inst. for Cosmic Ray Res., Univ. of Tokyo, 3—2—1, Midori-cho, Tanashi-shi, Tokyo 188, Japan.



- |                                       |   |                        |                    |     |  |
|---------------------------------------|---|------------------------|--------------------|-----|--|
| C4.2                                  | COSPAR Symposium on Cosmic Gama Rays (cosponsor with COSPAR). | Bangalore<br>INDIA     | June               | "B" | Z. Niemirowicz<br>51 bd de Montmorency <i>Paris</i>  |
| C7 COMMISSION ON ACOUSTICS            |   |                        |                    |     |  |
| C7.1                                  | The Mechanics of Sound Generation in Flows.                   | Göttingen<br>FRG       | August<br>28—31    | "C" | Prof. E. A. Müller<br>Max. Planck Inst. für Strömungsforschung,<br>Böttingerstr. 4—8,<br>D-3400 Göttingen,<br>FRG.                   |
| C8 COMMISSION ON SEMICONDUCTORS       |   |                        |                    |     |  |
| C8.1                                  | Insulating Layers on Semiconductors.                          | Durham<br>UK           | July<br>3—5        | "B" | Prof. G. Roberts<br>Dept. of Applied Physics and Electronics,<br>Durham University,<br><i>Durham, UK.</i>                            |
| C8.2                                  | Amorphous and Liquid Semiconductors.                          | Cambridge<br>MA, USA   | August<br>27—31    | "B" | Dr. William Paul<br>Div. of Applied Sciences, Harvard Univ.,<br>Pierce Hall, Oxford Str., <i>Cambridge, MA</i><br>02138, USA.        |
| C8.3                                  | Radiation Effects in Semiconductors and Related Materials.    | Tbilissi<br>USSR       | September<br>13—19 | "B" | Dr. E. L. Andronikashvili<br>Inst. of Physics, Academy of Sci. of the Georgian SSR, <i>Tbilissi, USSR.</i>                           |
| C9 COMMISSION ON MAGNETISM            |   |                        |                    |     |  |
| C9.1                                  | International Conference on Magnetism.                        | Munich<br>FRG          | September<br>3—7   | "A" | Prof. Dr. W. Zinn<br>Inst. für Festkörperforschung der KFA<br>Jülich, P. O. B. 1913,<br><i>D-5170 Jülich 1. FRG.</i>                 |
| C9.2                                  | Magnetic Semiconductors.                                      | Montpellier<br>FRANCE  | September<br>10—13 | "B" | Dr. M. Averous<br>C.E.E.S., Place E. Baillon, <i>34.060-Montpellier, France.</i>   |
| C9.3                                  | 9th International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces.  | Poznan<br>POLAND       | August<br>28—31    | "B" | Prof. L. Wojtczak<br>Dept. of Solid State Physics, Univ. of Łódź,<br>Banacha 22, <i>90-238 Łódź, Poland.</i>                         |
| C10 COMMISSION ON SOLID STATE PHYSICS |   |                        |                    |     |  |
| C10.1                                 | Fifth International Conference on Positron Annihilation.      | Lake Yamanaka<br>JAPAN | April<br>8—11      | "B" | Prof. R. R. Hasiguti<br>Science University of Tokyo, Faculty of Engineering, Kagurazaka,<br>Shinjuku-ku, <i>Tokyo</i><br>162, Japan. |



- |       |   |                                   |                    |     |   |
|-------|---|-----------------------------------|--------------------|-----|---|
| C10.2 | Sixth International Conference on Solid Compounds of Transition Elements. | Stuttgart<br>FRG                  | June<br>12—16      | "B" | Prof. Dr. A. Rabenau<br>Max-Planck-Institut<br>für Festkörperforschung, 7000 Stuttgart<br>80, Büsnauer Strasse<br>171, FRG. |
| C10.3 | Non-traditional Approaches to Study of Solid-Electrolyte Interface.       | Colorado<br>USA                   | September<br>24—27 | "C" | Prof. D. W. Lynch<br>Physics Department,<br><br>Iowa State Univ., Ames,<br>Iowa 500 10, USA.                                |
| C10.4 | Phonon Scattering in Condensed Matter.                                    | Providence<br>Rhode Island<br>USA | June<br>26—29      | "C" | Dr. Humphrey J. Maris<br>Dept. of Physics,<br>Brown Univ.,<br>Providence, Rhode<br>Island 02912, USA.                       |

## C11 COMMISSION ON PARTICLES AND FIELDS

- |       |  |                           |                    |     |  |
|-------|--|---------------------------|--------------------|-----|--|
| C11.1 | XVI International Conference on Electromagnetic and Lepton Interactions. | Batavia, Ill.<br>USA      | September<br>13—19 | "B" | Dr. John Peoples<br>Fermi National Accelerator Lab., P. O. Box<br>500, Batavia, Ill.<br>60510, USA.            |
| C11.2 | X International Conference on Multiparticle Dynamics.                    | Bangalore<br>INDIA        | June<br>?          | "C" | Prof. P. K. Malhotra<br>Tata Inst. of Fundamental Res., Bombay<br>400005, India.                               |
| C11.3 | The Unification Program-Einstein Commemorative Conference.               | Jerusalem<br>ISRAEL       | March<br>20—23     | "C" | Dr. Yuval Ne'eman<br>Tel Aviv Univ., Dept.<br>of Physics & Astronomy,<br>Tel Aviv, Israel.                     |
| C11.4 | Conference on Hypernuclear and Low-Energy Kaon Physics.                  | Jablonna/Warsaw<br>POLAND | September<br>10—15 | "C" | Prof. J. Pniewski<br>Inst. of Experimental<br>Physics, Univ., of Warsaw,<br>Hoza 69, 00-681<br>Warsaw, Poland. |

## C12 COMMISSION ON NUCLEAR PHYSICS

- |       |   |                     |                  |     |  |
|-------|---|---------------------|------------------|-----|--|
| C12.1 | 8th International Conference on High Energy Physics and Nuclear Structure (cosponsor with C11). | Vancouver<br>CANADA | August<br>13—17  | "B" | Dr. J. Sample<br>TRIUMF, Univ. of<br>British Columbia,<br>Vancouver, B. C. V6T<br>1W5, Canada.       |
| C12.2 | Nuclear Physics with Electromagnetic Interactions.  | Mainz<br>FRG        | June<br>5—9      | "B" | Dr. D. Drechsel<br>Inst. für Kernphysik,<br>Universität Mainz,<br>D-6500 Mainz, FRG.                 |
| C12.3 | 1979 Conference on Nuclear Cross Sections and Technology.                                       | Oak, Ridge<br>USA   | October<br>22—26 | "B" | Dr. Joseph. L. Fowler<br>Physics Div., Oak Ridge<br>National Lab., Oak<br>Ridge, Tenn. 38730<br>USA. |

## C13 COMMISSION ON ATOMIC MASSES AND FUNDAMENTAL CONSTANTS



- |  |  |                         |                           |     |   |
|--|--|-------------------------|---------------------------|-----|---|
| C13.1  | Sixth International Conference on Atomic Masses.   | East Lansing<br>MI, USA | September<br>17—21        | "B" | Dr. Walter Beneson<br>Cyclotron Lab., Michi-<br>gan State Univ., East<br>MI 48824, USA.   |
| C15 COMMISSION ON ATOMIC & MOLECULAR PHYSICS AND SPECTROSCOPY      |  |                         |                           |     |   |
| C15.1  | Fourth International Conference on Laser Spectroscopy.   | Rottach-Egern<br>FRG    | June<br>11—15             | "B" | Prof. Dr. H. Walther<br>Sektion Physik, Univ.<br>München, Am Cou-<br>lombwall 1, 8046<br>Garching, FRG.                                       |
| C15.2  | Herzberg 75th Anniversary. Weak Molecules.   | Québec<br>CANADA        | August<br>1—4             | "B" | Prof. L. Kerwin<br>Pavillon Casault, Univ.<br>Laval, Québec, P.Q.,<br>Canada GIK 7P4.   |
| C15.3  | 11th International Conference on the Physics of Elec-<br>tronic and Atomic<br>Collisions.                            | Kyoto<br>JAPAN          | August 29—<br>September 4 | "A" | Prof. K. Takayanagi<br>Inst. of Space and<br>Aeronautical Science,<br>Univ. of Tokyo, Ko-<br>maba 4—6—1, Me-<br>guro-ku, Tokyo 153,<br>Japan. |
| C15.4  | IVth Specialized<br>Colloque Ampère:<br>Dynamic Processes<br>Molecular Systems<br>as Studied by RF-<br>Spectroscopy. | Leipzig<br>DDR          | September<br>17—22        | "C" | Prof. Dr. A. Lösche<br>Karl-Marx-Universi-<br>tät, Sektion Physik,<br>DDR-701 Leipzig,<br>Linnéstr. 5,<br>DDR.                                |
| C16 COMMISSION ON PLASMA PHYSICS                                   |  |                         |                           |     |   |
| C16.1  | XIth International Conference on Phenomena in Ionized Gases.   | Grenoble<br>FRANCE      | July<br>9—13              | "A" | Dr. J. Taillet<br>Comité d'Organization<br>14e CIPIG, Ave.<br>d'Innsbruck, 38029<br>Grenoble Cedex,<br>France.                                |
| AC2 INTERNATIONAL COMMISSION ON GENERAL RELATIVITY AND GRAVITATION |  |                         |                           |     |   |
| AC2  | Jerusalem Einstein Centennial Symposium.   | Jerusalem<br>ISRAEL     | March<br>14—23            | "C" | Prof. A. Dvoretzky<br>Israel Academy of Sci-<br>ences and Humanities,<br>43 Jabotinsky Rd.,<br>Jerusalem 91040,<br>Israel.                    |
| AC2.2  | Albert Einstein Centenary Celebration.   | Berne<br>SWITZERLAND    | March<br>13—17            | "C" | Prof. A. Mercier<br>Inst. für theoretische<br>Physik, Sidlerstrasse 5,<br>CH-3012 Berne,<br>Switzerland.                                      |
| AC2.3  | Albert Einstein Centenary Symposium  | Princeton<br>USA        | March                     | "C" | Prof. H. Wolf,<br>Director<br>Ints. for Advanced<br>Study Princeton, N. J.<br>USA.  |



# KÖNYVISMERTETÉS

---

**J. C. Legros, J. K. Platten (ed.): Les instabilités hydrodynamiques en convection libre, forcée et mixte.**

Lecture Notes in Physics, 72. Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1978

A termodinamikai instabilitások, a nem-lineáris termodinamikai folyamatok, a kritikus állapotok elmélete az utóbbi években sok nemzetközi konferenciának volt a témája. A hidrodinamikai instabilitások vizsgálata — a termodinamikai instabilitások elméletéhez viszonyítva — az utóbbi években háttérbe szorult. (Talán csak a plazmainstabilitások elméleti és kísérleti vizsgálata tekinthető kivételnek.)

A brüsszeli Ecole de Thermodynamique által szervezett kollokvium (1977. április 27—29) résztvevői a hidrodinamikai instabilitások elméleti eredményeinek megvitatását tűzték ki célul. A Lecture Notes in Physics című sorozat 72. kötete az ezen a kollokviumon elhangzott előadások anyagát tartalmazza. A konferencián a témakör csaknem minden aktuális problémáját megvitaták: termokonvektív instabilitások porózus közegben és ritka gázokban; hidrodinamikai instabilitások két közeg határán: folyadékrétegek Rayleigh—Bénard-féle konvekciója; diffúziós instabilitások a magnetohidrodinamikai áramlásokban; konvektív instabilitások és a turbulencia; viszkoelasztikus folyadékok Poiseuille-féle áramlásának stabilitása.

Az egyes speciális hidrodinamikai instabilitások ismertetése rendkívül alapos, de a könyv a témakörrel nem ad átfogó áttekintést; ezért elsősorban a hidrodinamikai (és magnetohidrodinamikai) instabilitások elméletében járatos szakembereknek ajánlható.

Szabó János

**J. B. Keller, J. S. Papadakis (ed.): Wave Propagation and Underwater Acoustics**  
Lecture Notes in Physics, 70. Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1977

Noha a vízalatti akusztika az utóbbi évtizedekben lényeges fejlődésen ment át, az elmélet egzaktsága és gyakorlati alkalmazhatósága területén sok még a tennivaló. Ennek oka részint az, hogy nincs elég információ az óceánok fizikai (akusztikai) tulajdonságairól, részint az, hogy a vízalatti hangtér és az óceán fizikai paramétereinek analitikus kapcsolatát nem tudjuk egzaktul megadni. A vízalatti akusztika elméleti eredményeinek áttekintése, új eredmények ismertetése a tárgya a Lecture Notes in Physics című sorozat 70. kötetének. A kötet szerzői az óceán-akusztika szaktekintélyei: J. B. Keller (Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University), D. S. Ahluwalia (Courant Inst. Math. Sc.), R. Burridge (C. J. M. Sc.), H. Weinberg (Naval Underwater Systems Center, New London Laboratory), W. Kohler (Virginia Polytechnic Institute and State University, Blacksbourg), G. C. Papanicolaou (C. I. M. Sc.), F. D. Tappert (C. I. M. Sc.).

A könyv öt fejezetre oszlik: A hullámterjedés és a vízalatti akusztika áttekintése. A hangtér egzakt és aszimptotikus reprezentációi véges mélységű, inhomogén rétegezett óceánban. Horizontális sugarak és vertikális módusok. Hullámterjedés véletlenszerűen inhomogén óceánban. A parabolikus közelítő módszer.

A kötet a vízalatti akusztika elméleti kézikönyvének tekinthető. Megtalálható benne a vízalatti hangtér leírására használt matematikai módszerek részletes ismertetése, a különböző módszerek előnyeinek és hiányosságainak részletes elemzése. Haszonnal forgatják mindazok, akik vízalatti akusztikával, általánosabban folyadékokban gerjesztett kis amplitúdójú hullámokkal foglalkoznak.

Szabó János



**Inelastic Electron Tunneling Spectroscopy**  
**Proc. of the Int. Conf. and Symposium on Electron Tunneling, Univ. of Missouri-Columbia,**  
**USA, May 25—27,**  
**1977. Ed. Springer-Vlg. Berlin—Heidelberg—New York, 1978.**

A legutóbbi évtizedben számos új anyagvizsgáló módszer tűnt fel, vagy nyert polgárjogot. Ezek nagyobb része főleg a szilárdtest felületek vizsgálataival kapcsolatos. Gondoljunk csak a különböző elektron és ion besugárzásos eljárásokra az elektron és ion mikroszondától (EMP, IMXA) a szekunder ion tömegspektrometriáig (SIMS), vagy a töltött részecske aktivációs analízis különböző változataig nukleáris gyorsítókbán.

Ezek között a módszerek között külön gazdag családot képeznek az elektronspektroszkópia válfajai, amelyekben a szilárdtest felületéről különböző módszerekkel kiváltott elektronok spektrumát tanulmányozzuk és így kapunk kvalitatív vagy kvantitatív, sőt nyom- és szerkezet-analitikai információt. Így megemlíthetjük itt a röntgen és ultraibolya gerjesztéses fotoelektron spektroszkópiát (XPS vagy más néven ESCA és UPS), az Auger elektron spektroszkópiát (AES), az ionokkal kiváltott elektronok spektroszkópiáját (INS) vagy a karakterisztikus energiavesztéses elektronspektroszkópiát (ELS).

Neve ellenére a rugalmatlan elektron alagútspektroszkópia (IETS=Inelastic Electron Tunneling Spectroscopy) nem kapcsolódik szorosan ez utóbbi csoporthoz. Itt arról van szó, hogy két fémréteg (a gyakorlatban Al és rápárolgatott ólom) közötti vékony szigetelő rétegen (Al-oxid) az elektronok bizonyos körülmények között a kvantummechanikai alagút-effektussal juthatnak át. Ennek valószínűsége függ az átmeneti felületen elhelyezkedő atomoktól, molekuláktól, ill. ezek vibrációs állapotától. Ezek azután „szabályos” spektrum alapján is jelentkeznek, ha az átmenet áramfeszültség karakterisztikájának második deriváltját vesszük. Megemlíthetjük még, hogy az ilyen vizsgálatokat a folyékony He hőmérsékletén (4,2 °K) és a modulációs technikával végzik. A vizsgálandó molekulákat, gyűrűs vegyületeket, biológiai érdekes anyagokat az Al-oxid felületére kell felvinni. Az Electron Tunneling Spectroscopy a Raman és infravörös spektroszkópiához hasonló információkat szolgáltat, azokat egészíti ki.

A könyvben, amely a Springer egyik sorozatának tagjaként (Springer Series in Solid-State Sciences) jelent meg, egy olyan nemzetközi tudományos összejövetel előadásait találjuk, amelynek célja nemcsak az új tudományos eredmények előadása és megvitatása volt, hanem a módszer bemutatása az alkalmazási területek képviselőinek szélesebb községe számára. Így a könyv haszonnal forgatható e területen kezdők számára is.

A két fejezet közül az első maga a módszer, a második az alkalmazási területek, a harmadik az elméleti vonatkozások tárgyalásának van szentelve. Külön-külön fejezet foglalkozik azután a legújabb alkalmazásokkal, továbbá a molekuláris adszorpcióval nem-fémes felületeken, végül a rugalmas alagúteffektus alkalmazásával.

Kétségtelen, hogy az IETS egyedülálló tulajdonságokkal (pl. érzékenységgben) látszik rendelkezni számos alkalmazási területtel a felületi kémiában, a biokémiában, a kenés és adhézió jelenségének vizsgálatában stb., mindenütt, ahol komplex molekulák adszorpciója fémoxidokon szerepet játszhat.

Ma azonban még csak a módszer nagy lehetőségeiről beszélhetünk inkább, mint minden tekintetben igazolt alkalmazásairól. Erre utal a könyvben igen egyértelműen a középső fejezetben (IV. fejezet: Discussions and Comments) két felület-kutató és egy biológus hozzászólása. E tekintetben tehát a „Tunneling Spectroscopy” nem érte el azt az érettséget, mint a tulajdonképpeni elektron-spektroszkópia (XPS, UPS vagy APS).

*Berényi Dénes*

**Grauert—Fischer: Differential und Integralrechnung II.**  
**Heidelberger Taschenbücher. Springer-Verlag, 1978.**

A könyvecske alcíme, „Differentialrechnung in mehrere veränderlichen Differentialrechnung” közelebbről megjelöli a tárgyat. Az, hogy már harmadik, javított kiadás, mutatja hasznosságát, népszerűségét. A szerzők háromkötetes, differenciál- és integrálszámítással foglalkozó könyvének ez a második kötete a német egyetemi hallgatók 2. és 3. félév folyamán szerzett ismereteit tartja szem előtt. Ennek megfelelően csak a differenciál- és integrálszámítás alapjainak, valamint a vektortér fogalmának ismeretét tételezi fel. Mivel a szerzők egyetemi hallgatókhoz kívánnak szólni, törekszenek ugyan az elmélet szigorú és szisztematikus felépítésére, kerülnek azonban a szükségtelennek vélt



absztrakciókat és általánosításokat. Eljárásukat mélyíti a definíciók és módszerek olyan megfogalmazása, ill. felhasználása, hogy azok a lehető legközvetlenebbül a legáltalánosabb esetekre átvihetők legyenek.

A könyvecske első fejezetében az  $n$  dimenziós  $R^n$  tér kerül bevezetésre, a második ennek topológiájával foglalkozik, a harmadik a differenciálhatóság topológiájával kezdődik és eljut a több változós függvények esetében a Taylor-képlethez és sorhoz. A negyedik fejezet egzakt módon definiálja a kontra- és kovarians érintővektorokat, a Pfaff-féle formákat, bizonyítás nélkül a lineáris algebra itt felhasznált tételeit stb. Az ötödik fejezet problémafelvetést és módszereket, valamint rezgésegyenleteket tartalmaz. A Peano-féle egzisztencia tétel, a 6. fejezetbe, a differenciálegyenletek és a Pfaff-féle formák közötti összefüggés a következő, a közönséges és a magasabbrendű differenciálegyenletek rendszerének vizsgálata az utolsó, a 8. fejezetbe kerül. A tárgyalás egyes, az alkalmazás szempontjából fontos speciális differenciálegyenletek (a Bessel-, a Legendre-egyenlet, valamint a hidrogénatom Schrödinger-egyenlete radiális komponensének) megoldásával zárul.

Nálunk egyes főiskolán oktatók és oktatottak forgathatják haszonnal Grauert és Fischer tan-könyvét. (T. Gy.)

**R. J. Keyes (ed.): Optical and Infrared Detectors  
Topics in Applied Physics. Vol. 19.  
Springer-Verlag, 1977.**

Sir William Herschel 177 éve fedezte fel az infravörös sugárzást, amelynek mérése folytán számos anyagi tulajdonság (izotóparány, molekulaméreték stb.) meghatározhatóvá vált. A lézerjelekből nyerhető maximális információt a koherens infravörös jelek fázisa és frekvenciája adja.

A hat szerző által írt könyv második fejezete mintegy kerete, összefoglalója a többinek. A 3., 4. és 5. fejezet a termikus, a fotovezető és fotovoltaiikus, ill. a fotoemisszió jelenségeit tárgyalja a fotondetektor szemszögéből. Ez a három fejezet a folyamatok részletes tárgyalása, ügyes feldolgozása miatt önállóan is jó, érdekes olvasmány.

A 6. fejezet a CCD (Charge—Coupled Devices), valamint a nem lineáris fotonhatást, mint a gyenge infravörös jelekről sok információt szolgáltató új technikát tárgyalja. A CCD koncepciójának a detektor technológiával való „házassága” nagyon fiatal, gyorsan fejlődő tudományág, egyre jobb lehetőségeket nyújt, hogy összetett sugárzási környezetből ki lehessen választani kis jel-információkat.

A hetedik, az utolsó fejezet címe nem lineáris heterodin detektálás. Ez foglalkozik a lézerjelek elemzésével, felemlít bizonyos várható lehetőségeket.

A könyvet haszonnal forgathatja minden fizikus, fizikaoktató, műszeres mérnök, technikus.

(T. Gy.)

**E. A. Spiegel — J. P. Zahn (ed.): Problems of stellar convection  
Lecture Notes in Physics 71.  
Springer-Verlag Berlin—Heidelberg—New York, 1977.**

A sikeres sorozat 71. kötete a Nice-ben 1976 augusztusában megtartott hasonló című, 38. IAU kollokvium anyagát tartalmazza.

A csillagok belsejében van egy olyan réteg, ahol a fotonok energiája azonos nagyságrendbe esik a hidrogén vagy a hélium ionizációs potenciáljával. Itt a sugárzás energiájának nagy része az ionizációra fordítódik és a sugárzás képtelen az energiatranszportot fenntartani. Ha ez a részlegesen ionizált zóna elég vastag (ami a törpe csillagok esetén mindig teljesül) akkor a réteg instabilissá válik és megindul a konvektív áramlás. Mivel az energiatranszport módja a csillag belső felépítése szempontjából is fontos, a konvektív áramlás elméletének döntő jelentősége van a csillagok belső szerkezetének kutatásánál.

A könyv első fejezetében a konvekció klasszikus, „Mixing Length” elméletével foglalkozik négy szerző. L. Biermann, a konvekció elméletének egyik megalapítója a témakör történetét foglalja össze. D. Gough igen alapos tanulmányban mérlegeli a „Mixing Length” elmélet valóságtartalmát és arra a megállapításra jut, hogy érvényessége elég bizonytalan.

A második fejezet teljes egészében P. Ledoux kitűnő előadását tartalmazza „Dinamikus instabilitások a csillagokban” címmel.



A *harmadik fejezet* a megfigyelésekről szól. P. Namba és R. van Rijsbergen, illetve A. Nesis a Nap granulációs szerkezetének speciális tulajdonságaival foglalkozik, míg R. Lindzen a meteorológiai analógiákat mutatja be.

A *negyedik fejezet* a konvekció numerikus modelljeit mutatja be (két előadás), míg az *V. fejezet* —ben a forgás és a mágneses tér hatásával foglalkozik négy szerző. Különösen érdekes F. Busse előadása, amelyben a forgó csillag konvekciójának laboratóriumi modellezését is bemutatja.

A rövid *hatodik fejezet* a konvekciós rétegnek a környező tartományokkal való kölcsönhatásával foglalkozik, a *hetedik fejezet*be pedig a különféleket sűrítették össze a szerkesztők. Kiemelendő A. Wicket előadása, aki az úgynevezett „Helium Flash”-re is konvektív magyarázatot javasol.

A könyvet lezáró három fejezet közül az első kettő a nem közvetlenül a témához tartozó előadásokat tartalmazza. A *nyolcadik*ban a hullámokról, a *kilencedik*ben a turbulenciáról szóló előadások találhatók. A *tizedik fejezet*ben pedig D. Gough egy korábbi cikkét találhatjuk „Stellar Convection” címmel.

A könyv igen jó segédanyag a csillagok belső szerkezetével foglalkozó kutatók, valamint a csillagász és fizika szakos egyetemi hallgatók számára, hiszen ilyen témájú összefoglaló munka — tudomásom szerint — még nem jelent meg a nemzetközi csillagászati szakirodalomban. A hasonló, szimpóziumanyagokat tartalmazó könyvek esetében fellelhető inhomogenitás jegyei nem lelhetők fel, így a könyv egységes monográfiaként is olvasható. Az egyetlen kifogásolnivaló talán csak az, hogy a csillagok konvektív zónájának modelljéről nem esik benne szó.

Marik Miklós

**J. A. Azcárraga (ed.): Topics in Quantum Field Theory and Gauge Theories  
Springer Lecture Notes in Physics 77.**

A könyv a VIII. Salamancai Nyári Elméleti Fizika Szemináriumon (1977. június) elhangzott előadások anyagát tartalmazza. Az előadások tematikája az elméleti részecskefizika legújabb és legizgalmasabb problémáit öleli fel (zsák-modellek, nem-triviális topológiájú klasszikus megoldások, perturbációs számítás magas rendjeinek becslése, lepton-hadron egyesítési modellek stb.). A szerzőként változó stílus és előadásmód ellenére az egyes fejezetek felépítése világos, könnyen követhető. A könyv anyagának elsajátításához az egyetemi térelméleti előadások anyagán túlmenő ismeretek nem szükségesek — kivéve talán R. Hermann előadását, melyhez bizonyos jártasság a modern differenciálgeometriában előnyös lehet. A különböző előadások között elkerülhetetlenül vannak bizonyos tartalmi átfedések, de ezek inkább megkönnyítik, mint hátráltatják a kérdéses témakör elsajátítását.

Az első előadás (P. Goddard: Mágneses monopólusok és hasonló objektumok) lényegében a 't Hooft-Poljakov megoldással és ennek a Dirac-monopólushoz való viszonyával foglalkozik. Az egész vizsgálgatás motivációját adó; kétdimenziós modellekben talált ekvivalencia (Sine-Gordon és Thirring modellek, Noether és topológiai áramok) bemutatása után az elektromágnességet a nem-Abeli mértékelméletek prototípusaként vezeti be. Ezután — az elemi homotópia-elméletet használva — tárgyalja a klasszikus mértékelméletek kiterjedt megoldásait, majd az elektromágnesség nem-Abeli mértékelméletbe történő beágyazását adja a 't Hooft-Poljakov monopólusra koncentrálva.

A második előadás (R. Hermann: „Modern” differenciálgeometria az elemi részek fizikájában) motivációját az adja, hogy a szerző a részecskefizikában egy egységes geometriai elmélet körvonalait véli kibontakozni. Ezért az első fejezetekben ezen elmélet leírásához szükséges fogalmakkal — a modern differenciálgeometria alapvető fogalmaival (sokaság, vektortér, fibrált terek és ezeken értelmezett konnektiók, Lie-algebra értékű formák stb.) ismerteti meg az olvasót. Az elvontabb matematikai leírásról minden lehetséges helyen bemutatja a fizikusok által ismertebb alakjukat is (pl.: konnektió-Yang Mills terek). A második részben az új fogalmak segítségével tárgyalja a szolitónokat — ezen belül külön részletességgel a matematikai fizikában érdekes szerepet játszó Korteweg-de-Vries egyenlet megoldásait.

A következő előadás (J. Wess: Szuperszimmetria és szupergravitáció) hasonlóképpen elvi témakörrel foglalkozik. A szuperszimmetria fogalmának bevezetése után röviden tárgyalja az algebrai és annak reprezentációit. Ezután — tanulópéldaként — differenciálgeometriai módszerekkel megkonstruál egy  $SU(N)$  mérték-invariáns szuperszimmetrikus térelméleti modellt, és diszkutálja tulajdonságait; végül a szupergravitáció elméletének lezáró levezetése zárja az előadást.

A negyedik előadásban (J. Zinn-Justin: A perturbációs sorok magas rendjei és a vákuum instabilitás) megismerkedhetünk egy új — az úntegrálok nyeregpontmódszerrel történő becslésén alapuló — módszerrel, mely lehetővé teszi, hogy a perturbációelmélet magas rendű tagjaira becslést



adjunk. A módszert a legegyszerűbb közönséges integráloktól kezdve a kvantummechanikán és a különböző dimenziókban felírt  $\varphi^4$  térelméleteken keresztül egészen a csak bozonokat tartalmazó mértékelméletekig rendkívül sokoldalúan alkalmazza. Azokban az esetekben, ahol a perturbációs sorok patológiásan viselkednek (nem Borel-összegezhető), kimutatja, hogy ennek okát a naív perturbációs számítás alapállapotának instabilitásában; a klasszikusan különböző, degenerált állapotok közötti alagút-effektusban kell keresnünk.

A könyv utolsó három előadása „fenomenológiaiabb” problémákkal foglalkozik. Ezek közül az elsőnek (A. J. G. Hey: Az MIT-zsák modell fenomenológiai vonatkozásai) előnye, hogy a zsákmodell egyenleteinek és filozófiájának bemutatásán túlmenően összehasonlítást is ad a modell és „előzményei” (potenciálmódellek) között. Ezután részletesen tárgyalja — a rögzített üreg közelítésében — a csak könnyű kvarkokból álló alap- és első gerjesztett állapotú mezonok és barionok spektroszkópiáját és sztatikus tulajdonságait, valamint bizonyos fotokeltési tulajdonságokat is.

A zsákmodell egyéb jöslatait illetően (nehéz kvarkot tartalmazó spektroszkópia, hadron-hadron és lepton-hadron folyamatok) azonban az olvasónak — minden bizonnyal korlátozott terjedelme miatt — a hivatkozásokra kell hagyatkozni.

Nagyon rokon témával foglalkozik a könyv utolsó előadása (R. H. Dalitz: Kvarkok, szín- és hadronspektroszkópia). A kvarkokra valamint az ezek kölcsönhatásait leírni hivatott szín- mértékelméletekre vonatkozó ismeretek tömör bemutatása után a különböző „kvarkbezáró” potenciálokról ad áttekintő képet. Ezután az itt bemutatott eszközökkel tárgyalja az elméleti és kísérleti barion és mezonspektrumot; a tárgyalás kiterjed a nehéz (charmed) kvarkot tartalmazó állapotokra is.

Rendkívül nagyszabású vállalkozás a könyv utolsó előtti — kétrészes — előadása (J. C. Pati: Bevezetés az egyesítésekhez). A gyenge és elektromágneses kölcsönhatás egyesített leírását adó Salam-Weinberg modellből kiindulva jut el a kvarkokat és leptonokat valamint kölcsönhatásaikat egyesítve kezelő elméletekig. Részletesen bemutatja a két alapvető alternatívát: a bezárt, töltött kvarkokat és bezárt szín- kvantumszámot tartalmazó chromodinamikát; valamint a kiszabaduló szint, és kiszabaduló, egész töltésű kvarkokat tartalmazó Pati-Salam modellt. Az előadás anyagának elsajátítását nagyon megkönnyíti a lényeges pontok táblázatokban történő összefoglalása.

*Palla László*

**M. Cardona and L. Ley (edit.): Photoemission in Solids I.  
(General Principles)**

**Topics in Applied Physics (Vol. 26.) Springer-Verlag, 1978.**

A könyv témája: a fotoelektron spektroszkópia alkalmazása a szilárdtestek elektron-struktúrájának kutatására.

A könyv célja: a fotoelektron spektroszkópia alkalmazásának bemutatása, speciális példák felsorolása, áttekintve — már amennyire lehet — a jelenleg legérdekesebb területeket; a félvezetőket kivéve nem menve a felületi effektusok és abszorbeált felületi rétegek teljes diszkussziójába. Mivel ma már sok készülék egyaránt alkalmas gázkisüléses lámpák UV-jének és röntgenfluoreszcencia felhasználására, a kötet tárgyalási módja is kettős: a módszer általános elveinek és alkalmazhatósági területeinek ismertetésekor foglalkozik a röntgen-fluoreszcenciával, az Auger-spektroszkópiával, a karakterisztikus energiavesztésekkel stb., a jelenlegi kísérleti technikával, a munkafüggvény elméleti és kísérleti részletes diszkussziójával. Ezután kerül sor a fotoemisszió elméletének, majd azoknak a feltevéseknek ismertetésére, amelyek pl. a háromlépcsős modell kialakításához vezettek. Utána jön a fotoionizációs keresztmetszet számítása, a sok-elektronos és végállapot-effektus, a röntgen-fotoemisszió line shape-jében a Fermi-felület gerjesztései fémek esetében, s végezetül az ex fotoemisszió szögfüggése.

A könyv egyik értéke a történelmi tárgyalásmód, a kutatás fejlődésének ismertetése. Számunkra zavaró az az egyoldalú elképzelés, hogy: az új műszerek vezetnek új gondolatokhoz a kutatókat. Ez így van, de fordítva is áll: a kutatók kíváncsiak a műszerek létrehozását. Mi inkább más kutatási terület lehetőségeinek saját céljainkra való alkalmazásának ötletét, mint előbbre vivő tényezőt, hangsúlyoznánk. (T. Gy.)



**R. H. Kingston: Detection of Optical and Infrared Radiation**  
**Springer Series in Optical Sciences. Springer-Verlag, 1978.**

A könyv tankönyv jellegű, szerzője előadásokon át csiszolta anyagát. Megmutatkozik ez például abban is, hogy az egyes fejezetek végén néhány feladatot is ad a szerző. A tárgyalás szelleme, célja, az anyag frissesége, megítélhetősége érdekében megemlítek egynéhány ilyen feladatot:

a) Egy 300 K hőmérsékletű „fekete test” térrel egyensúlyban van egy felület: mekkora a teljes sugárzás a felületen; melyik hullámhossznál van maximuma az egységnyi frekvenciára eső sugárzásnak;

b) Egy tökéletes fotodetektor kimenő kapacitása 10 pF; 100 MHz sávszélességű jel detektálására kívánjuk felhasználni. 5 dB zajú felfogó erősítőt és egy szobahőmérsékletű detektor terhelést használva, milyen helyi oszcillátor teljesítmény teszi a detektorzajt éppen egyenlővé az erősítő zajával. A hullámhossz legyen 10  $\mu\text{m}$ .

c) Egy diffúzfelületű szférikus műhold-target átmérője 1 m, sebessége 8  $\text{km}\cdot\text{s}^{-1}$  300 km magasságban. 10  $\mu\text{m}$  hullámhosszú, monokromatikus frekvenciájú megvilágítást használva, mekkora a Rayleigh-eloszlású válasz fluktuációjának sebessége, mikor a target éppen fejünk felett halad?

A könyv tárgya: a sugárzó tér viselkedésére vonatkozó optikai és infravörös detektálás alapjai, a detektorok fizikai tulajdonságai és a detektor kimenetel statisztikus viselkedése. A feldolgozás azonos módon kezeli a koherens és nemkoherens detektálást, analizál egyes alkalmazási módokat, az atmoszféra hatását, a jelstatisztikát. A tárgyalást a Planck-féle hősugárzási törvény levezetésével és több, a szövegben sokfelé használt alapvető koncepció bemutatásával kezdí, így a Boltzmann, Fermi—Dirac, Bose—Einstein hőeloszlási törvényekkel, a spontán és a stimulált emisszióval, az elektromágnes térmódus definiálásával és megszámlálásával. Az utolsó fejezet a radar, a radiometria és interferometria, mint az előzőekben tárgyalt alkalmazásának demonstrációja.

A szerző nem törekedett enciklopédikus tárgyalásra, sem teljes referencia nyújtására, vagy mindenfajta típusú detektor diszkussziójára; csak alapokat kívánt lerakni egyes, általa távlatként jelölt részletesebb feldolgozás megértéséhez. (T. Gy.)



Technikai szerkesztő: Turchányi György  
A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Sándor István  
A kézirat beérkezett: 1978. IX. 27. — Terjedelem: 6,65 (A/5) ív  
78-5106 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József igazgató











## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Tarján Imre</i> : Köszöntő .....	3
<i>Lovas István</i> : Szalay Sándor és a magyar kísérleti magfizika .....	7
<i>Dr. Kocsár László</i> : Szalay Sándor szerepe a hazai kísérletes orvostudomány fejlődésében .....	23
<i>Vogl Mária</i> : Szalay Sándor több évtizedes hatékony működése az orvostudományokban .....	31
<i>Belák Sándor</i> : Szalay Sándor munkássága az agrártudományok területén .....	45
<i>Szalay Sándor</i> tudományos munkáinak jegyzéke .....	53

## A IUPAP HÍREI

Az 1978-ban Stockholmban tartott XVI. közgyűlés által megválasztott IUPAP tisztségviselők és a nemzetközi bizottságok tisztségviselői, valamint tagjai .....	59
IUPAP konferenciák 1979-ben .....	65

## KÖNYVISMERTETÉSEK

<i>J. C. Legros, J. K. Platten</i> (ed): Les instabilités hydrodynamiques en convection libre, forcée et mixte .....	69
<i>J. B. Keller, J. S. Papadakis</i> (ed): Wave Propagation and Underwater Acoustics .....	69
Inelastic Electron Tunneling Spectroscopy .....	70
<i>Grauert—Fischer</i> : Differential and Integralrechnung II. ....	70
<i>R. J. Keyes</i> (ed): Optical and Infrared Detectors .....	71
<i>E. A. Spiegel and J. P. Zahn</i> (ed): Problems of Stellar Convection .....	71
<i>J. A. Azcárraga</i> (ed.): Topics in Quantum Field Theory and Gauge Theories .....	72
<i>M. Cardona and L. Ley</i> (ed): Photoemission in Solids I. ....	73
<i>R. H. Kingston</i> : Detection of Optical and Infrared Radiation .....	74



✓ 307.226

IV.

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

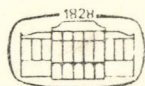
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR  
ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
PÁL LÉNÁRD

XXVII. KÖTET

2. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1979



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10-10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetemi tanár

Biofizikai Intézet

1444 Budapest VIII. Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 72 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



## JÁNOSSY LAJOS, A FIZIKUS ÉS AZ EMBER\*

Ezen rövid írás keretében nem kívánjuk Jánossy Lajos részletes és pontos életrajzát, valamint teljes tudományos munkásságát ismertetni, ezt már több helyen mások megtették. Itt néhány gondolatot, eseményt, eredményt szeretnénk leírni, amellyel úgy gondoljuk, valamennyivel teljesebbé tehetjük a Jánossy Lajosról alkotott képet.

1912-ben született Budapesten, Mátyásföldön. Később sokszor beszélt erről, azokról az időkről, amikor gyermek volt még. A Tanácsköztársaság bukása után nevelőapjával Lukács Györggyel és édesanyjával Bortstieber Gertruddal Ausztriába emigráltak. Egyetemi tanulmányait Berlinben végezte, majd Angliában, utána Írországbán dolgozott. 1950-ben, a magyar kormány hívására hazatért Magyarországra. Ennél az adathoz egy pillanatra megállunk és elgondolkodunk. E fölött a tény fölött, bár megemlítik — általában el szoktak siklani. Pedig ez óriási dolog volt. Otthagyni az Írországbán éppen csak megteremtett munkafeltételeket, a családot kiszakítani a megszokott környezetből azért, hogy hazajöjjön segíteni itthon tudásával, tapasztalataival megteremteni a korszerű fizikai kutatás lehetőségét. Akkor, amikor ugyan egyik oldalról itthon élő édesanyja nagyon szerette volna, hogy fia hazajöjjön, de másik oldalról a barátok szóban, írásban figyelmeztették, hogy alaposan gondolja meg, mit tesz, hiszen nem lehet pontosan tudni, mi van itthon, mi vár rá. Gondoljuk meg, mindössze néhány év telt el a II. világháború befejezése után. Az intelmek ellenére hazatért, és elkezdődött a nagy munka, amelyben részt vett, egy korszerű fizikai kutatóintézet létrehozása. E sorok írójának egy korai emléke 1950 őszéről, amikor egy napon elvitték Csillebércre, ahol sáros, havas úton mentek vagy 10 percet az erdőn át, ahol valaki azután rámutatott egy kiásott gödörre és azt mondta: „Itt lesz”. Mármost az intézet. És fokozatosan valóban felépült a Központi Fizikai Kutató Intézet. A nevezetes gödör valahol a mai IV. épület helyén volt. De a felépítés nem volt elég, el kellett érni, hogy dolgozni is lehessen az intézetben, hogy az egész ne csak „kirakat” legyen, hanem valóban tartalommal legyen megtöltve. Mint Jánossy Lajos később mesélte, ez óriási erőfeszítésbe került, de sikerült.

Jánossy Lajost úgy emlegették gyakran, hogy semmi érzéke nincs a mindennapi élet gyakorlati dolgaihoz. Az igaz, hogy a mindennapi élet dolgaival nem nagyon foglalkozott, de érzéke azért ezekhez volt. Manchesterben a II. világháború idején

\* Jánossy Lajos akadémikusnak, a Magyar Fizikai Folyóirat alapító főszerkesztőjének 1978. március 2-án bekövetkezett halálakor közölt megemlékezésben megígértük, hogy egy nem sablonos visszaemlékezéssel is el fogunk búcsúzni tőle.



elromlott a rádiónk, s ő az egyetemről hazahozott műszerek segítségével megjavította. Dublinban egy alkalommal három fiával hazatérve, a házat üresen találta. Bevásárolt, utána vacsorát főzött mindannyiunknak. Ez egyesek számára később annyira hihetetlennek tűnt, hogy e sorok íróját egy alkalommal külföldről felhívták és megkérdezték, hogy ez igaz volt-e? 42 éves korában, igen nagy akaraterővel megtanult úszni, 60 évesen pedig autót vezetni. Kedvenc időtöltése volt Märklin-elemből működő órát készíteni. Szerette a természetet, különösen jól érezte magát és igen sokat sétált az észak-balatoni vulkanikus hegyek vidékén. Az első szputnyik fellövése után többször felment a közeli Gellérthegyre megfigyelni ennek átvonulását. Tudta és átérezte, hogy ez egy igen komoly új kornak, az űrkutatásnak a kezdete.

A fizika életének egyik legfőbb eleme volt. Nagyon sokszor gondolkozott, foglalkozott ezzel kapcsolatos problémákkal. Olyan nevek környezetében élt, mint Schrödinger, Heitler, Dirac, akiket a gyerekek úgy ismertek meg, mint általában „Pista bácsi” vagy „Kati néni”-t szokás ebben a korban, s fogalmuk sem volt, hogy ezen nevek mögött igazából milyen személyek vannak. Először kozmikus sugárzással foglalkozott, de később elsősorban a fizika alapkérdései, kvantummechanikával és relativitáselmélettel kapcsolatosak érdekelték. De ezek sohasem elvontan, hanem mindig élő fizikai problémához kapcsolódóan. Nem „halmaz”, „tenzor”, „folytonos” stb. szavak jellemezhetnék munkáját, bár ezt nagyon nehéz pontosan megfogni, hanem „elektron”, „térrő”, „mozgás”. Ezzel azt szeretnénk kifejezni, hogy a fizikában nem az absztraktot, az elvontat használta, hanem sajátos „élő” fizikát művelt és fejlesztett. Matematikai tudása igen nagy volt, de ezt mindig a fizika szolgálatába állította. Szívesen gondolkozott és foglalkozott néha számelméleti vagy halmazelméleti problémákon, de ez számára inkább érdekes játék volt, mivel ezeknek közvetlen szerepük a saját fizikai munkájában nem volt. Sokszor beszélt a matematika és fizika szerezéről, egymáshoz való viszonyáról. Arról, hogy sokszor a fizika igényei fejlesztettek ki egyes matematikai ágazatokat, mint pl. a differenciál- és integrálszámítást, valamint a vektoranalízist. És hogy a matematikai analízis oktatási rendszerében a mindenáron „precízségre” való törekvés egyszerűen elfedi a lényegét, azt a matematikát, amit a fizikusnak igazából tudni és alkalmaznia kell. Nem vitatta a precizitásnak létjogosultságát, mint mondta „vannak speciális esetek, ahol csak ennek segítségével lehet eligazodni, bár ezek elég ritkák” — tette még hozzá. A mérnök-tanár- és fizikus-oktatásban túlzottnak tartotta, ahogyan a precíz analízist előadták. „Semmi sem igazán teljesen precíz, mindig lehet továbbmenni, de meg kell találni azt a precizitási fokot, amelyre ténylegesen szükség van” — mondta. Ugyanakkor felháborodással beszélt arról, hogy a fizikában sokszor nem konvergáló végtelen sorokkal és integrálokkal dolgoznak, nem törődve a precízséggel itt, ahol pedig tényleg szükség lenne rá. Az egyetemre kerülő gyermekeinek „védőoltást” adott, megtanította nekik a differenciál- és integrálszámítás alapvető elemeit, hogy az analízis sűrűjében azután el ne tévedjenek. Ezen nyári kurzusok alapján születtek azután a „szemléletes differenciál-, illetve integrálszámítás” című könyvek.

A relativitáselmélet már gyermekkorától kezdve érdekelt. Itt az volt a célja, mint minden, a fizika alapjaival foglalkozó munkájában, a relativitáselmélet állításait és eredményeit a józan ész számára elfogadható formában felépíteni, megmagyarázni. Tehát szó sem volt arról, hogy a relativitáselmélet fizikai tartalmában, eredményeinek helyességében a legcsekélyebb mértékben is kételkedett volna, csupán a tér görbesége és az idő lelassulása absztrakt fogalmai helyett, a természetnek sokkal inkább megfelelő képét adta az elméletnek.





Jánossy Lajos és első felesége, Kahn Leonie 1964-ben.

Az általa kidolgozott, a „Lorentz-elv”-en alapuló relativitáselmélet felépítése végeredményben matematikailag nem különbözik a szokásostól és nem is ad attól eltérő eredményeket. Csupán Jánossy Lajos inkább azt volt hajlandó hinni, hogy a híres Michelson-kísérletben az interferométer rúdjaival történik valami változás annak elforgatásakor, mivel az atomokból áll és az atomokat erők tartják össze, mintsem azt higgye, hogy a „tér”, vagy az „idő” szerkezete változik meg. Eredményei közérthető formában való ismertetésére született a „Relativitáselmélet és fizikai valóság” című könyve, de mint ennek előszavában is kifejezte, ez a könyv nem vita-írat, hiszen a pontos tudományos alapokat részletesen nem ez tartalmazza, hanem nagy monográfiája: „A relativitáselmélet a fizikai valóság alapján”.

A kvantummechanika alapkérdéseivel és ezzel kapcsolatban a fény természetével igen sokat foglalkozott. Úgy érezte, hogy a mai modern fizika kérdéseivel csak akkor tudunk érdemben és rendesen foglalkozni, ha az alapokkal teljesen tisztában vagyunk. Itt pedig sok probléma volt még megoldatlan. Számára a hullámfüggvény értelmezésében az „elkent elektron” fogalma egészen természetes volt, tehát az, hogy  $e|\Psi|^2 dV$  az elektron tényleges sűrűségét jelenti, szemben az általában elfogadott valószínűségi értelmezéssel, ahol az elektron pontszerű és a függvény abszolút érték négyzete a megtalálási valószínűségét adja meg. Többször hangsúlyozta, hogy a kvantummechanika matematikai formája és az ebből nyerhető eredmények ugyanazok, bármelyik interpretációt is vesszük alapul, de hát akkor miért ne azt vegyük, ami a józan ész számára egyszerűen belátható és érthető. A „kvantumugrásokat” és azt, hogy a természet folytonos jellege a kvantummechanikában megszűnik, nagyon meggyőzően tudta magyarázni, azt hogy itt igazából miről is van ténylegesen szó. Az atomok saját állapotai azok, amelyekben az atom relatíve nyugalomban van



és nem sugároz elektromágneses sugárzást, s ezek a stabil elektronállapotok bizonyos meghatározott energiával rendelkeznek. Ha azután valamilyen perturbáció éri az atomot, sugározni kezd, állapota a felső és alsó energiaszint hullámfüggvényeinek kombinációja lesz, s folyamatosan sugároz ezeken keresztül, amíg az összenergiát kisugározva az alsó állapotban megnyugszik. Szó sincs semmiféle hirtelen „kvantumugrásról” végtelen rövid idő alatt. Egy ízben Heisenberggel beszélgetve, az csodálkozva kifakadt: „Minden jó fizikusnak tudnia kell, hogy a kvantummechanika fogalmai mögött valójában milyen fizikai háttér áll”. De Jánossy Lajos már tapasztalta, hogy az újabb generáció nincs tisztában az alapkérdések problémáival, ami még Schrödingert — és másokat — annak idején foglalkoztatott.

A foton problémája és a fény kettős természete egyike volt Jánossy Lajos mindig visszatérő alapkérdéseinek. A fény természetével kapcsolatban egyszer a következő tartalmú írás jelent meg egy humoros hetilapban. — Az ördög eljön a tudóshoz, hogy elkérje a lelkét és cserébe bármit felajánl. A tudós azt válaszolja, hogy a fény kettős természetének titkát szeretné tudni. Az ördög azt válaszolta, „van nálunk a pokolban egy speciális csoport, amelyik mindent tud, azok majd megmondják ezt is” s ezzel eltávozik a tudós lelkével. Néhány nap múlva azonban savanyú képpel visszatér, visszaadja a tudósnak a lelkét, s mondja: „Sajnos ezt a dolgot nálunk sem tudják.” — Jánossy Lajos jót mulatott ezen az íráson, s hangoztatta, egészen biztos, hogy órála mintázták a tudóst. A fény természetével kapcsolatos vizsgálatok során sok évi kísérleti és elméleti munka segítségével tisztázódott a foton-koincidencia kísérletek eredményeinek valódi fizikai háttere, s az az effektus, ahol látszólag a fotonok szétszakadnak is világos magyarázatot nyert az atomok sugárzását és a sugárzás ingadozásait figyelembe vevő elgondolások segítségével. Persze tisztázatlan kérdések azért maradtak még, mint például a fotoeffektus esetén az energiamegmaradás kérdése. A szokásos fizikai felfogásban ezt a problémát a fotonok mint részecskék megoldják, de nem érthető akkor, hogy ezek a részecskék hogyan tudnak interferenciajelenséget mutatni. A kvantummechanikai formalizmus helyesen írja le az összes kísérletek eredményét, de Jánossy Lajos elsősorban arra volt kíváncsi, hogy ez a formalizmus a természetben valójában mit is jelent. A Heisenberg-féle határozatlansági reláció fontosságát általában túlbecsülték szerinte, s kijelentette: „Gondoljuk meg, próbálta-e már valaki egyáltalán egy elektron helyét, vagy impulzusát külön-külön tényleges kísérletben megmérni, nemhogy egyszerre”.

Utolsó éveiben erőteljesen dolgozott azon, amit ő „konzekvens hullámmechaniká”-nak nevezett. Nem gondolta azt, hogy a Schrödinger-egyenlet abszolút érvényű, könnyen elképzelte, hogy érvényességének határai vannak. Kiindulása a Schrödinger-egyenlet, a hullámmechanika alapjai és ezek pontos matematikai leírása volt, s arra volt kíváncsi, hogy mindenféle közelítés és matematikai trükk nélkül meddig lehet így elmenni a természet helyes leírásában. Fontos eredmény volt, hogy a hidrogénatom viselkedését, — figyelembevéve a sugárzás visszahatását az atomra, — helyesen kéttest-problémaként kell tárgyalni, s ekkor sok matematikai nehézség eltűnik és több fizikai kérdés megoldódik. Úgy tűnik, a konzekvens hullámmechanika alapján a fény problémája, a hullámrészecske-kérdés is megoldást nyert. Annak idején Einsteinnek a fényre vonatkozó túsugárzás elméletét Selényi kísérlete miatt vetették el, amely kimutatta, hogy az atomok sugárzása nagy szögben is képes interferálni, azaz fényűket nem egy szűk kúpban sugározzák. (Megjegyezzük, hogy Jánossy Lajos próbálta megkeresni az irodalomban a túsugárzás eredeti Einstein-féle leírását, de ilyet nem sikerült találnia.) Jánossy Lajos kimutatta, hogyha feltesszük, hogy a sugárzó atomot



nem pontszerűnek tekintjük, hanem hagyjuk kitágulni az egész térfogatba (ezt a hullámcsomag időbeli szétfolyása alapján, mely gondolat Schrödingertől származott), s így a teljes térfogatot figyelembe véve számítjuk ki a sugárzás térbeli eloszlását, akkor kiderül, hogy az atom egy kúpban sugároz, ahol a kúpszöget a fényforrás lineáris mérete és a hullámhossz szabja meg. Ha a lineáris méret nagy, a kúpszög kicsi és a sugárzás „tű”-szerű, ha a lineáris méret kicsi, a kúpszög nagy. Ez utóbbi eset felel meg a Selényi-kísérletnek, ahol a fényforrás valóban nagyon vékony volt. Ez a mostani „tűsugárzás” azonban a szigorú hullámmechanikai számítás alapján született, amely azt is megadta, hogy az atom a felsőből az alsó állapotba való átmenetkor éppen  $h\nu$  energiát sugároz ki. Az elmélet finomítása során a hidrogénatom energiaszintjeire a Lamb-féle eltolódásra emlékeztető effektus adódott. Nem derült ki azonban, hogy ez valóban az vagy sem, az élet vége akadályozta meg sok minden mással együtt ezt is. A végső cél a kvantum-elektrodinamika megértése volt. Jánossy Lajos sokszor mondta, a kvantum-elektrodinamika formalizmusa jó, hiszen helyes eredményeket kapunk belőle, csak jó volna megérteni, hogy a formalizmus valójában mit takar.

Élete utolsó hónapjaiban is lankadatlan energiával próbált dolgozni. Akik részt vettek az utolsó szemináriumán, azok valószínűleg mindig emlékezni fognak rá. Az irodalomban ismertetett újabb foton-koincidencia kísérletekről volt szó. Jánossy Lajos azt mondta el, hogy elképzelése szerint ezen kísérletek eredményeinek mi lehet a magyarázata. A kísérletek szerint egy igen speciális fényforrás esetén extrém alacsony fényintenzitásoknál a félig áteresztő tükör révén létrehozott két fénynyaláb között nincsenek koincidenciák, s ez a szerzők szerint a szemiklasszikus elmélet alapján már nem magyarázható meg. Jánossy elmondta, hogy szerinte a félig áteresztő tükör viselkedését kell alaposan felülvizsgálni, mielőtt kijelentjük, hogy ezt az effektust a szemiklasszikus elmélet nem magyarázza. A hullámmechanikai számítás alapján az atomok által kisugárzott fénykúp (a foton) térben nagyon inhomogén, külön „módus”-szerkezete van, s így fluktuálva gerjeszti a félig áteresztő tükörben az atomokat, amelyek a gyenge csatolás révén végül is felváltva, hol az egyik, hol a másik nyalábba sugározzák a fényt. Szigorúan hozzátette, hogy ez persze csak kvalitatív meggondolás, pontos számításokkal kellene ezt bebizonyítani. Két nap múlva nagyon izgatottan telefonált e cikk szerzőjének. „Azt hiszem, megtaláltam a szemiklasszikus elmélet és a kvantummechanika közötti alapvető különbséget, ha a számítás helyes, — de én azt hiszem, hogy igen” — mondta, s mivel éppen influenzásan feküdtem az ágyban, megbeszéltük, hogy ezt majd később részletesen megtárgyaljuk. A sors azonban beleszólt, másnap reggel Jánossy Lajost kórházba szállították. Amikor ereje látszólag javult, újra csak a fizikáról beszélt néhány mondatot, s elmondta gondolatait a konzekvens hullámmechanika, a fotonelméletnek további fejlesztésére. És hozzátette „ha svindlizni kell, hogy mi tartozik a szemiklasszikushoz, akkor már nem jó; nagyon komplikált a számítás”. A továbbiakat azután az 1978. március elején megjelenő lapok adták hírül...

Jánossy Lajos általában jóindulattal, megértéssel közeledett embertársaihoz, soha nem érezte, hogy nagy tudós. Persze néha mérges lett, ha alapvető fizikai ismerethiány vagy tévedés került elő, de a harag sohasem volt igazán tartós. Nem nyerte el tetszését az sem, ha elsőéves egyetemi hallgató a relativitáselmélet speciál előadására járt algebragyakorlat helyett, vagy fizikus egyetemi hallgatók a fizika alapjait döngető elmélet kidolgozásával foglalkoztak, mielőtt a meglevő fizikát alaposan elsajátították volna.



Egy dolog volt azonban, amit Jánossy Lajos sohasem értett: hogy van az, hogy elgondolásait, amely számára úgy tűnt, hogy a természeti jelenségek kézenfekvő, egyszerű, logikus magyarázata, a fizikus társadalom igazából nem képes magáévá tenni. Ezek az ő számára — és a közelállók részére — valóban a fizika egyszerűbb, érthető képét adták, de a kívülállóknak elképzelései és eredményei sokszor csak „a Professzor úr különleges elgondolása”-t jelentették. Sok esetben valószínűleg csak a munkáiba való valódi, alapos belemélyedés hiányzott, amiről meg kell állapítanunk, hogy nem könnyű feladat, mivel munkái a fizika igen magas színvonalán mozognak, s alapos matematikai tudás is szükséges azok megértéséhez. A fény fluktuációiról szóló cikkéről valamelyik munkatársa kijelentette, hogy ez az egyik legjobb munkája. Később ezt elemezve, közösen megállapítottuk, hogy ez valóban igaz, csak nagyon érződik a cikkben még az „izzadságszag”, mert ugyancsak nem volt könnyű még számára sem a fizikai probléma megoldása.

Sokan rajongtak Jánossy Lajosért anélkül, hogy igazán értették volna munkáinak lényegét. Az egyszerű emberek mindig tisztelték, s számukra élményt jelentettek azok a televíziós adások, ahol népszerű formában ismertette a fizikát, ahogy ő látta és ahogy mondta egyszer: „Van a nagy tudomány és van, amit meg lehet érteni”.

Szokványos befejezés helyett itt abbahagyjuk az írást.

*Jánossy Mihály*



# VÉKONYRÉTEGEK KRISTÁLYAINAK NÖVEKEDÉSE IDEGEN ANYAGOK ATOMJAINAK JELENLÉTÉBEN

BARNA ÁRPÁD, BARNA B. PÉTER, RADNÓCZI GYÖRGY, TÓTH LAJOS

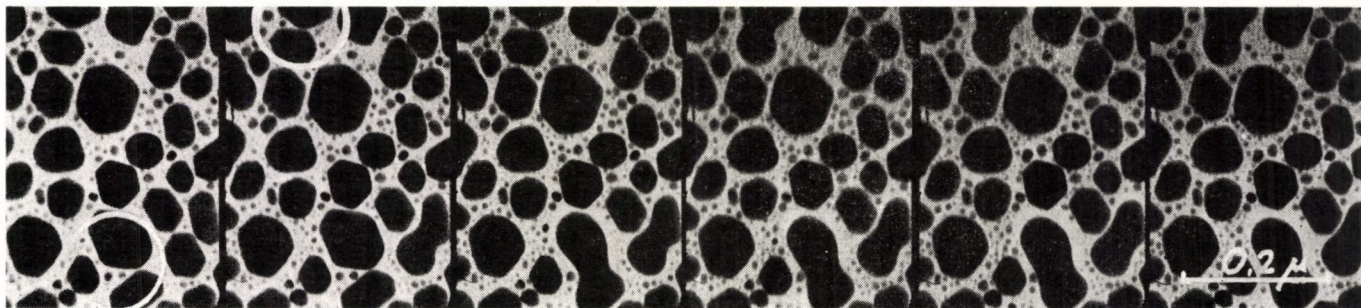
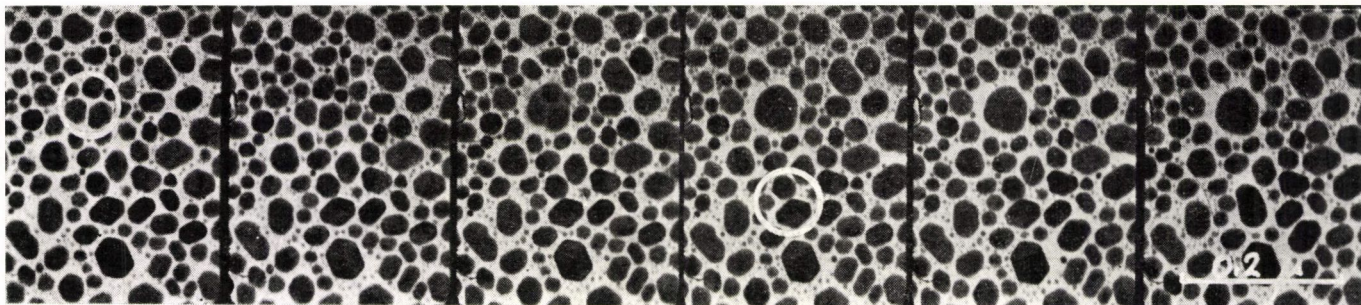
MTA Műszaki Fizikai Kutató Intézet

## 1. Bevezetés

A vékonyrétegek amorf hordozón történő kialakulása a kristálynövekedés és -növesztés sajátos esetét jelenti, amennyiben igen nagyszámú magból kiindulva egyidejűleg nagyszámú kristály növekedése megy végbe. (Kétdimenziós „zöm-kristályosodás” esete.) A rétegkialakulás kezdeti szakaszát a hordozó és a réteg anyagra jellemző adhéziós és kohéziós energia viszonya, valamint a túltelítettség mértéke határozza meg [1]. Kezdetben a kristályok három-dimenziós növekedése lényegében egymástól függetlenül megy végbe. E folyamatban akkor következik be döntő változás, amikor a felnövő kristályok egymással érintkeznek (1. ábra). A legtöbb esetben szubmikroszkópos méretű — néhány 10, 100 nm kiterjedésű — kristályok érintkezéséről, majd összenövéséről van itt szó. A rétegnövekedés közvetlen elektronmikroszkópos megfigyeléséből ismerjük, hogy e kristályok összenövése igen gyors folyamat lehet, hasonló a folyadéksepek egyesüléséhez, s eredményeként ismét egykristály keletkezik (1. *a*) ábra), [2, 3, 4, 5]. A kristályok összenövése, egyesülése során a folyamatban résztvevő eredeti egykristályoknak nemcsak az alakja, de általában orientációja és elhelyezkedése is megváltozik (2. ábra). Egy-egy, kezdetben egy magból különállóan növekedett kristály a réteg felépülése során ilyen összenövések és átkristályosodások sorozatában vesz részt. Úgy tekinthetjük, hogy a réteg kialakulásának ebben a szakaszában — a *szemcseösszenövés I*-nek nevezett szakaszban — a kristálynövekedésben az ugrásszerű növekedés, egy több szemcsére kiterjedő közös folyamat játszik döntő szerepet. A szemcseösszenövésnek új formája jelenik meg — *szemcseösszenövés II* — amikor a felnőtt kristályok mérete meghalad egy kritikus értéket. Ez az összenövés lassú folyamat lesz. A kristályok érintkezési pontjából kiindulónak képződik a kristályok között, s ez fokozatosan kitöltődik a felületi diffúzió által szállított anyaggal (1. *b*) ábra). Ezt követően a szemcsehatár kivándorlása és ezzel egyidejűleg szemcsenövekedés is végbemehet. A réteg-kialakulásnak ezt a szakaszát szigetek és közöttük elhelyezkedő csatornák jellemzik. A réteg a csatornák feltöltődésével válik összefüggővé és ettől kezdve a kondenzálódó atomok a réteg kristályait a hordozóra merőleges irányban növesztik. Számolnunk kell természetesen az összefüggő rétegben is egy folytonos szemcsenövekedéssel, esetleg átkristályosodással, amelynek eredménye az a megfigyelés, hogy a vékonyrétegek szemcsemérete a réteg vastagságával nő [6]. A szemcsemeretnövekedés mértéke az előállítási hőmérsékletétől, a szemcsehatárok szerkezetétől és összetételétől, valamint a felnövő kristályok hibaszerkezetétől és a beépült feszültségtől függ.

A rétegnövekedésnek az előzőekben vázolt folyamatai igen jól követhetők a szakaszonként vett minták szemcsemereteloszlásának statisztikáival [7]. E statisztikák kiértékelése útmutatást nyújt az egyes szakaszokban hatékony folyamatokra is.





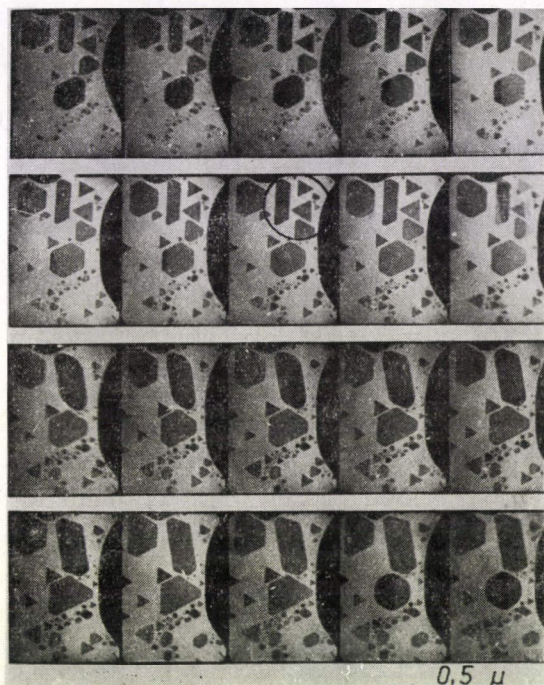
1. ábra. Az egymással érintkező kristályok összenövésének formái indium rétegnek amorf szénhártyán történő előállítása esetén:

a) kristályok folyadékszerű összenövése  $T_{\text{hordozó}} : 60^{\circ}\text{C}$ ;  $P_{\text{maradékgáz}} : 5 \times 10^{-6} \text{ Pa}$ ; a kondenzáció sebessége:  $0,5 \text{ nm/s}$ ;

b) kristályok összenövése nyakképződéssel  $T_{\text{hordozó}} : 20^{\circ}\text{C}$ ; a többi paraméter azonos az a)-ban megadottakkal



Idegen anyagok atomjainak jelenléte, részvétele a kristályszerkezet atomonkénti felépítésében az említett folyamatokat megváltoztathatja. Megváltozhat ennek következtében a rétegek kristályszerkezete (módosulata, a kristályok rendezettségének formája és foka), összetétele inhomogénné válhat (kiválások, zárványok keletkezhetnek), s mindezek eredményeként más fizikai és kémiai tulajdonságok jelennek meg.



2. ábra. Kristályok folyadékszerű összenövése, amikor a keletkező kristály elhelyezkedése is eltér az eredeti kristályokétól. In réteg növekedése  $\text{MoS}_2$  egykristály lapkán.  $T_{\text{hordozó}} : 60^\circ \text{C}$ ;  $P_{\text{maradék-gáz}} : 5 \times 10^{-6} \text{ Pa}$ ; a kondenzáció sebessége:  $0,2 \text{ nm/s}$

Ha azonban ismerjük a különböző anyagok együtt kondenzálódó atomjainak elrendeződési, a kristályszerkezetet felépítő folyamatát és az előállítás paramétereinek ezekre kifejtett hatását, sajátos és előre megtervezett szerkezetű és tulajdonságú rétegek előállítását tarthatjuk kézben. Olyan ismeretek birtokába juthatunk, amelyek új technológiák kidolgozására adnak lehetőséget pl. adalékanyagoknak megtervezetten és ellenőrzöttén történő beépítésével. Másrészt, ha ismerjük a gáztérben jelenlevő, a réteg szempontjából szennyeződésként szereplő idegen atomok beépülési folyamatát és módját, az előállítás paramétereinek célszerű megválasztásával elkerülhetjük a rétegek szennyeződését.



A dolgozatban az idegen anyagok atomjainak a felnövő kristályokba történő beépülésével foglalkozunk olyan anyagpárok esetén, amikor az egyik anyag atomjai nem épülnek be a másik kristályrácsába, s nem is oldódnak számottevően. Vizsgálataink körét elsősorban arra az esetre korlátozzuk, amikor az idegen anyag, a második összetevő csak kis koncentrációban van jelen a réteget építő atom- illetve molekula-áramban.

Vékonyrétegek esetében, mint mondtuk, sok kristály növekedése megy végbe egyidejűleg azonos körülmények között. Így e folyamatok vizsgálatából a kristálynövekedés még kevésbé tisztázott alapfolyamataira is nyerhetünk közvetlen tájékoztatást.

## 2. A kísérleti módszerek

Vizsgálatainkat vákuumpárologatással előállított alumínium és indium rétegeken végeztük. Idegen anyagként nikkel, oxigén és annak reakciótermékeként keletkező oxid, valamint a maradékgázban jelenlevő szénhidrogének szilárd bomlásterméke szerepelt. Ez utóbbinak hatását elsősorban az elektronmikroszkópban végzett in situ kísérleteink során vizsgáltuk. E kísérletekben, amint jól ismert, ez nagy mennyiségben keletkezhet az elektronsugár által megvilágított területeken.

A kísérleteket egyrészt közvetlenül az elektronmikroszkópban, másrészt olajdiffúziós szivattyúval működő és cseppfolyós nitrogénes kifagyasztóval (Meissner csapdával) kiegészített vákuumpárologatóban végeztük. A rétegek előállítása alatt az össznyomás az egyes kísérletek során  $5 \times 10^{-3}$ – $10^{-5}$  Pa közötti érték volt. Hordozóként üveg fedőlemez, illetve a transzmissziós elektronmikroszkópos vizsgálatok céljára az elektronmikroszkópiában használt tárgytartó rostélyra felvitt vékony kollódium és szén, illetve  $\text{SiO}_x$  hártját alkalmaztunk. A hordozó hőmérséklete az egyes kísérletekben 290 és 600 K közötti érték volt. A rétegek szerkezetét transzmissziós elektronmikroszkópos és diffrakciós módszerrel vizsgáltuk. A vastagabb, 1  $\mu\text{m}$  vastagságú rétegeket nagyfeszültségű (1 MV gyorsítófeszültségű) elektronmikroszkóppal vizsgáltuk. A kristályfelületek morfológiáját platina árnyékolású egylépéses szénréteg lenyomaton jelenítettük meg.

A rétegek készítéséhez használt alumínium alapanyag 99,999% tisztaságú volt, amelyet tisztított és előizzított GK minőségű volfrám huzalról, illetve elektronbombázásos forrásból párolgattunk el. A kondenzáció sebességét 0,2–17 nm/s között változtattuk, amelyet rezgőkvarcos vastagságmérővel regisztráltunk. A vizsgált rétegek vastagsága 50 nm és 1  $\mu\text{m}$  között változott. A nikkel ugyancsak volfrám huzalról párolgattunk el. Kondenzációjának sebességét külön rezgőkvarcos vastagságmérő felhasználásával állítottuk be az összetételnek megfelelő értékre. Az elektronmikroszkópban végzett in situ kísérleteinket a korábban leírt kísérleti berendezéssel végeztük [8]. Az elektronokkal besugárzott mintarészen akkor jelent meg a szénhidrogének szilárd bomlásterméke, ha nem működöttük a kísérleti térben elhelyezett gőzcsapdát. E kísérletek során a besugárzott és nem besugárzott területek összehasonlításából is értékes adatokat lehetett nyerni a szennyeződés hatására.



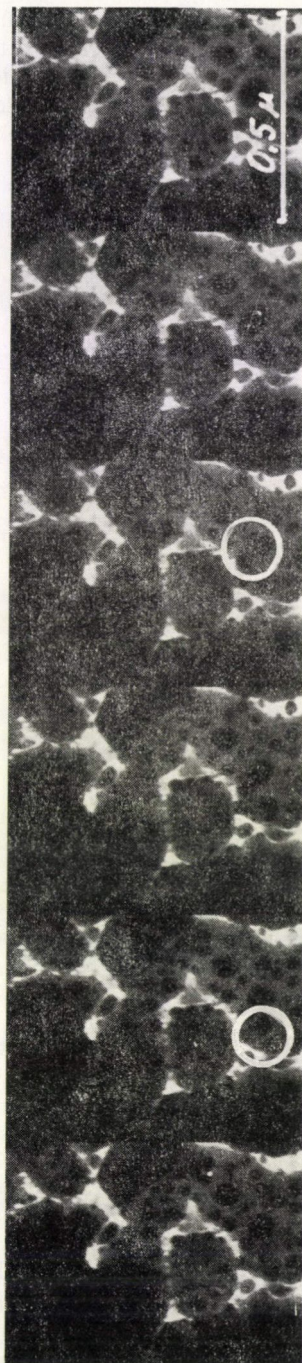
### 3. Kísérleti eredmények

Ebben a fejezetben azokat a kísérleti eredményeket foglaljuk össze, amelyeken jól lehet tanulmányozni a beépülési folyamatokat és a kialakuló szerkezetek egyes sajátosságait.

#### 3.1. Összefüggő záróréteg kialakulása indium kristályok felületén

Ez a folyamat akkor volt igen tisztán megfigyelhető, ha az indium réteg kialakulása közben az elektronsugár hatásaként megjelentek a maradékgáz szénhidrogén összetevőinek szilárd fázisú bomlástermékei is. Kezdetben az 1. ábrán is látható szabályos alakú kristályok nőttek fel, s zavartalan volt az érintkező kristályok folyadékszerű összenövése is. A kristályok növekedésével a szabályos kristályalak egyre jobban romlott, az élek letompultak. Egy adott fázisban a nagy szemcsék növekedése megszakadt, felületükön új réteg kialakulása, magképződés és szemcsék növekedése, majd összenövése indult meg. (3. ábra). Az ilyen körülmények között keletkező réteg egymás mellé és egymás fölé nőtt kristályok halmaza [9]. A szemcsehatárokat az idegen anyag összefüggő hártája borítja. Tapasztalat szerint az ilyen felépítésű vékonyrétegek hőkezelés során nem, vagy csak igen kismértékben változnak. Erősen gátolt mind a rekristallizáció, mind a szemcsenövekedés.

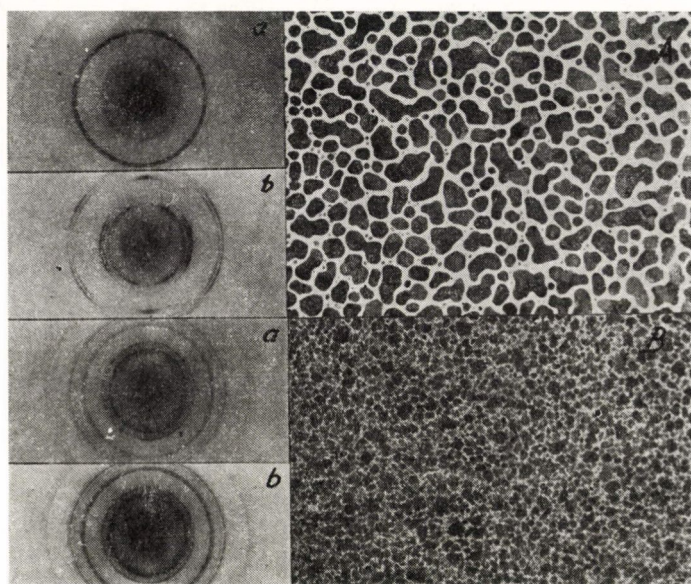
Hasonló jelenség figyelhető meg indium-és alumíniumrétegek előállításakor, ha a maradékgázban viszonylag nagy az oxigén parciális nyomása ( $>10^{-3}$  Pa), az előállítás sebessége pedig alacsony ( $<2$  nm/s). A folyamat közvetlen megfigyelése azt mutatja, hogy a maradékgáz szennyező hatásaként keletkező, a kristályok felületét részben vagy egészben borító szennyezőhártya (oxidhártya) kis stabilitású. A kialakult új szemcséket ugyanis, amint az az in situ kísérletekben jól megfigyelhető volt, gyakran „benyeli” az alakp kristály. Ez arra utal, hogy az oxidhártya könnyen megsérülhet.



3. ábra. Új magképződés, kristálynövekedés és összenövés az In réteg felülről kristályainak felületén kialakult szennyezőrétegen. A szennyezőréteg a maradékgáz szénhidrogén összetevőinek bomlásterméke. Hordozó: amorf szénhártya;  
 $T_{\text{hordozó}} : 30^\circ\text{C}$ ;  $P_{\text{maradékgáz}} : 10^{-3}$  Pa gőzcsapda nélkül; A kondenzáció sebessége:  $0,2$  nm/s



A rétegbe beépülő szilárdfázisú idegen anyag mennyisége és beépülésének módja határozza meg, hogy a szemcsék teljes lefedődése egyáltalán bekövetkezik-e, s ha igen, mekkora szemcseméretnél. Ettől függ az is, hogy az idegen anyag beépülésének milyen hatása lesz a kristályszerkezetre. A 4. ábra azt mutatja, hogy oxigén jelenlétében csökkent az alumíniumrétegek szemcsemérete, nem tudott kifejlődni textúra.



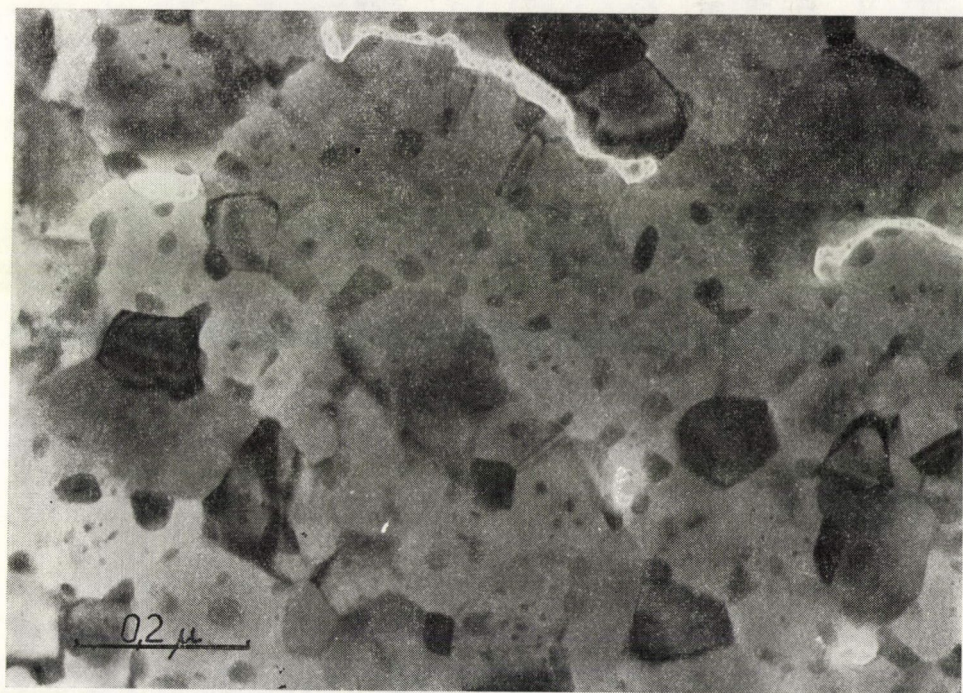
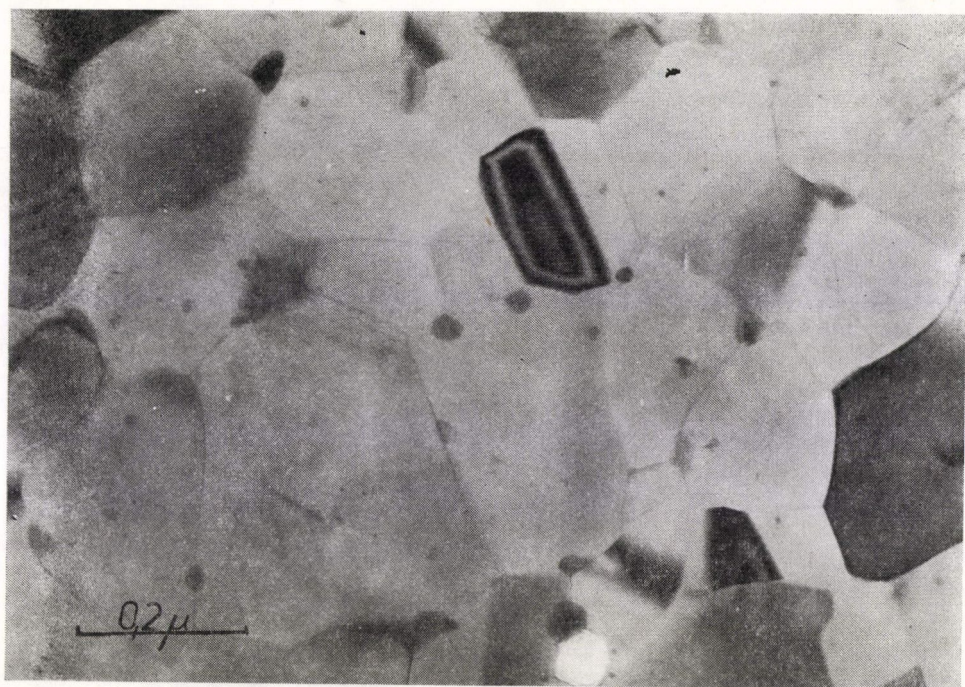
4. ábra. A maradékgáz hatása az In rétegek szemcseméretére és kristályszerkezetére. A merőlegesen (a) és a döntött helyzetben (b) elhelyezett minták transzmissziós elektrondiffrakciója mutatja a textúraszerkezet meglétét (A) minta, vagy hiányát (B) minta. Hordozó: amorf szénhártya;  $T_{\text{hordozó}}: 20\text{ }^{\circ}\text{C}$ ; kondenzáció sebessége:  $0,2\text{ nm/s}$ ;  $P_{\text{maradékgáz}}$ : az A minta esetében  $10^{-4}\text{ Pa}$ , a B minta esetében  $5 \times 10^{-3}\text{ Pa}$

### 3.2. Nikkel beépülése alumíniumrétegekbe

Az 5 a) és b) ábra alumínium és nikkel gőzsugár együttes kondenzálódásának eredményeként kialakult rétegek szerkezetét mutatja. Az a) ábrán látható réteg nikkeltartalma  $0,5\%$ , míg a b) ábrán látható rétegé  $5\%$ . A kis nikkeltartalmú rétegben nem figyelhetők meg kiválások, vagy csak elvétve. A nikkeltartalom növelésével a kiválások száma és mérete is nő. Az 5 b) ábrán bemutatott felvétel egyértelműen bizonyítja, hogy nagy mennyiségű nikkel vált ki a jelenlegi szemcsehatárokon. Feltételezhetjük azonban azt is, hogy a szemcsék belsejében levő kiválások korábban szintén szemcsehatárokon voltak, azok helyét jelzik.

A kis nikkeltartalmú rétegben a nikkel elhelyezkedését a jelenleg rendelkezésre álló vizsgálati módszereinkkel nem tudtuk meghatározni. Valószínű, hogy ebben az





5. ábra. Al és Ni együttes kondenzációja során kialakuló réteg szerkezete.  
Hordozó: amorf szénhártva;  $T_{\text{hordozó}} : 220^{\circ}\text{C}$ ;  $P_{\text{maradék}} : 10^{-4}\text{ Pa}$ ; az Al kondenzációjának sebessége:  $2,5\text{ nm/s}$ ; a rétegek összetétele és vastagsága: a)  $0,5\text{ súly \% Ni}$ ,  $100\text{ nm}$ ; b)  $5,0\text{ súly \% Ni}$ ,  $50\text{ nm}$



esetben is a szemcsehatárokon van feldúsulva, anélkül azonban, hogy kiválás keletkezne.

A nikkel tartalom növelésével a réteg [111] textúrája fokozatosan romlik, a szemcse méret csökken.

### 3.3. Kristálynövekedés alumínium vékonyrétegekben oxigén jelenlétében

Az 1  $\mu\text{m}$  vastagságú rétegek szemcséinek mérete az előállítás körülményeitől függ és a 0,5–10  $\mu\text{m}$  közötti tartományba esik. A  $10^{-4}$ – $10^{-5}$  Pa nyomástartományban magasabb hordozóhőmérsékleten (500–600 K) viszonylag nagy 10–17 nm/s sebességgel előállított rétegek krisztallitjai jól kifejezettek, méretük az 5–10  $\mu\text{m}$  tartományba esik. A réteg felületéről készített lenyomat igen szép, s egyben változatos növekedési szerkezetet mutat (6. ábra). Megfigyelhetjük, hogy ez a növekedési szerkezet kristályról kristályra változik.

A 6. ábra áttekintő felvételén látható, hogy egyes kristályok nagyméretűre nőttek (10  $\mu\text{m}$ ), míg a környezetükben levők lényegesen kisebbek maradtak. Jól kitűnik



6. ábra. Az 1  $\mu\text{m}$  vastag Al réteg felületének szerkezete. (Egylépéses C+Pt lenyomat) Hordozó: polírozott üveglap  $T_{\text{hordozó}}$ : 300 °C;  $T_{\text{maradék-gáz}}$ :  $10^{-4}$  Pa; a kondenzáció sebessége: 17 nm/s



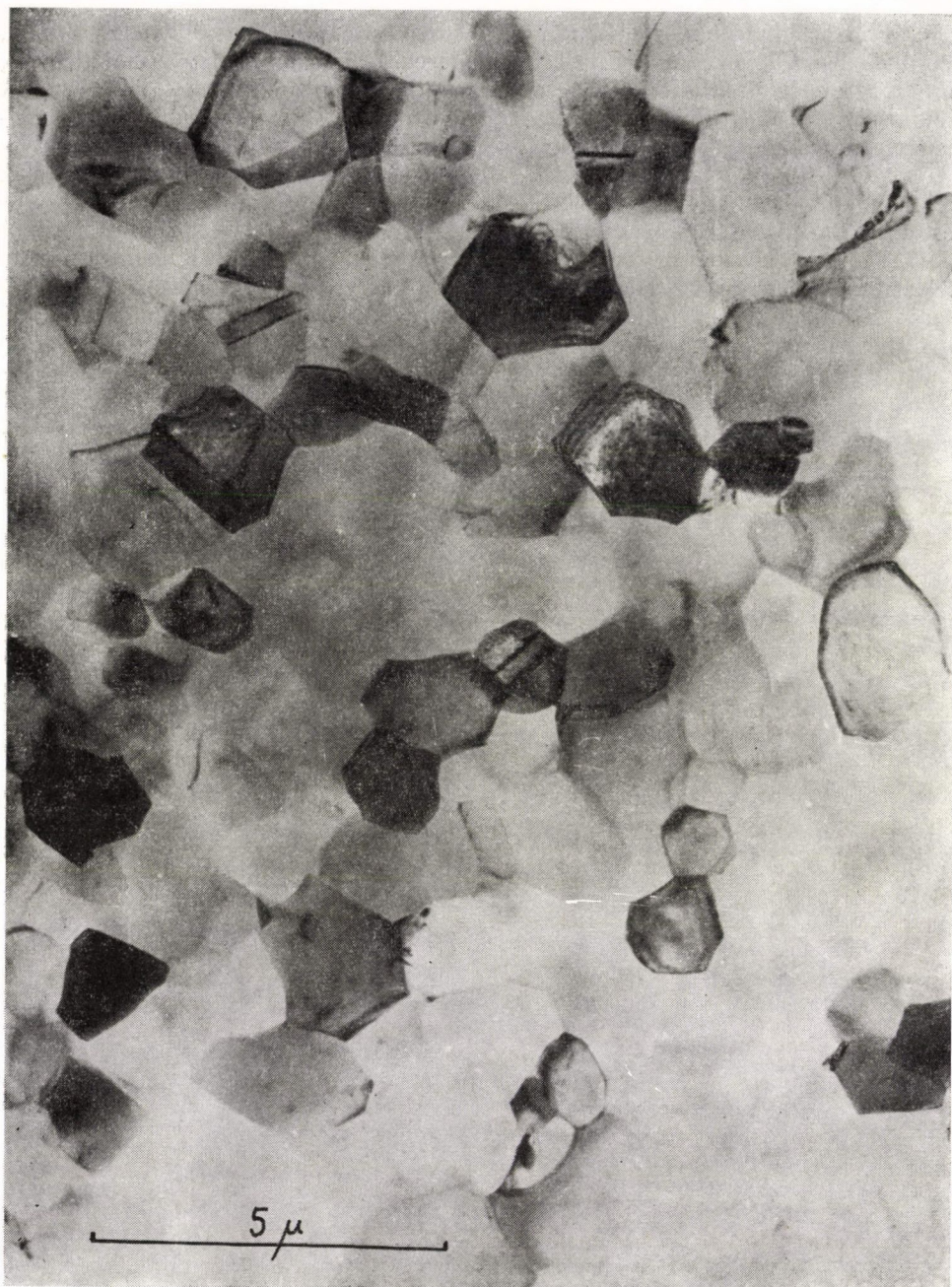
a 7. ábrán bemutatott felvételből, hogy egyes szemcsék felületén a növekedési lépcsők, pontosabban a növekedési lépcsők csoportjai igen sűrűn vannak jelen (A-val jelöltük), míg más kristályok felülete — ezen a szinten — csaknem „hibamentes” sík felületnek tekinthető (B-vel jelöltük). E rétegek, röntgendiffrakciós vizsgálat alapján, [111] orientációt mutatnak.

A lépcső-csoportokkal sűrűn dekorált felületeken érdekes képződmények hívják fel magukra a figyelmet, az Y-nal jelzett tartományok. Ezek bemélyedések, s a lépcső-csoportok alakjából arra következtethetünk, hogy a növekedési lépcsők továbbhaladását ezeken a helyeken valami gátolta. A réteges kristálynövekedés ezeken a helyeken lelassult, az alumínium adatomoknak kisebb a megkötési valószínűsége itt, mint a szomszédos helyeken. Egyes kristályok felületén ilyen folyamatok eredményeként nagyobb átmérőjű, határfelületükön bemélyedésekkel dekorált üregek kialakulása indult meg (7. ábra).



7. ábra. Az 1  $\mu\text{m}$  vastag Al réteg kristályának felületén megjelenő növekedési szerkezet. (Egylépéses C+Pt lenyomat.) Az előállítás körülményei azonosak a 6. ábrán bemutatott réteggel. Jelölések: X-halmok, Y-bemélyedések

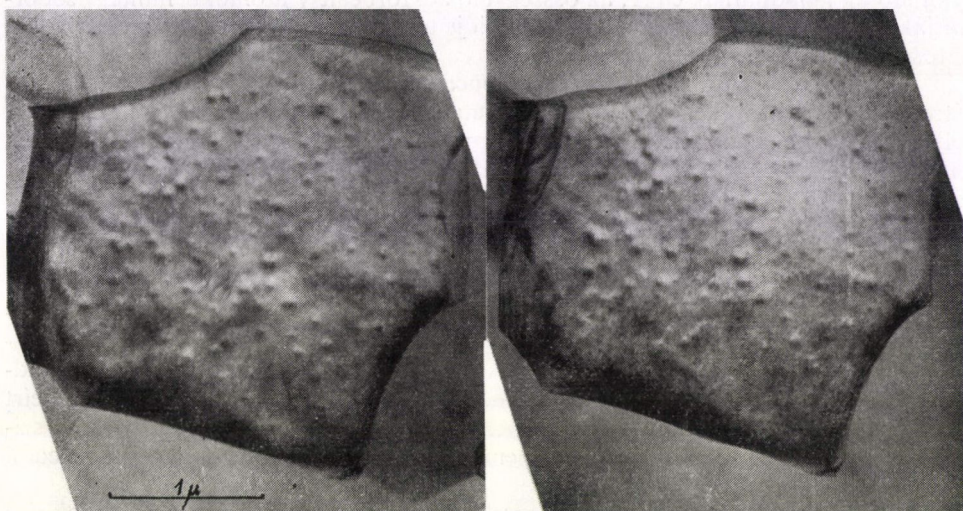




8. ábra. Az 1  $\mu\text{m}$  vastag Al réteg szerkezete  
(1 MV gyorsítófeszültségű transzmissziós elektronmikroszkóppal készült felvétel).  
A réteg azonos a 7. ábrán bemutatott réteggel



E vastag rétegek nagyfeszültségű transzmissziós elektronmikroszkópos vizsgálatának eredménye szintén tükrözi a felületi morfológiával már jelzett szerkezetet (8. és 9. ábra). Kiválások figyelhetők meg a szemcsehatárokon. Az idegen anyagnak, az új fázisnak a szemcsék felületén kialakult képződményei benyúlnak a szemcsék felület alatti rétegébe is (9. ábra sztereo felvételei). Sűrűségük az egyes szemcsékben eltérő.



9. ábra. A zárványokat tartalmazó kristályokról nagyfeszültségű transzmissziós elektronmikroszkópban készült sztereopár. Látható, hogy a zárványok a felület-közeli rétegben helyezkednek el. A réteg azonos a 7. és 8. ábrán bemutatott réteggel.

A kristályszerkezetet vizsgálva kitűnik, hogy a beépült szennyezés mennyiségének növekedése gátolja a textúraszerkezet kialakulását. Egy értéken túl a textúra teljesen eltűnik (l. 4. ábrát) s nem alakul ki szálszerkezet sem. Ezekre a rétegekre a 3. ábrán bemutatott szerkezet a jellemző. Nemcsak a hordozóra merőleges irányban vannak tehát szemcsehatárok, hanem azzal párhuzamosan is. A réteg egymás mellett és egymás fölött elhelyezkedő, rendezetlenül irányított kristályok halmaza, amelyeket idegen anyag hártája választ el egymástól.

#### 4. Az eredmények értelmezése. Következtetések

Az előzőekben tárgyalt kísérletek, amint arra már utaltunk, olyan anyagpárookra vonatkoznak, amelyeknek atomjai nem épülnek be sem egymás rácsába, sem rácsközti helyekre, nem oldódnak egymásba.

Az ilyen, kis koncentrációban jelenlevő idegen anyag atomjainak beépülési folyamatát a vastag alumíniumrétegek felületén megfigyelhető növekedési szerkezet elemzésének alapján (6. és 7. ábra) a következőképpen írhatjuk le.

A réteg felnövő kristályainak felületére egyidejűleg érkeznek a réteg anyagának és az idegen anyagnak az atomjai. Ezek a felületen mozoghatnak, s a magképző helyeken,



illetőleg az egykristály-felületek réteges növekedésének növekedési lépcsői mentén megkötődnek. A réteg anyagának saját atomjai (U) beépülnek a rácsba, elsősorban a lépcsők mentén, míg az idegen anyag atomjai (V) először adszorbciónal kötődnek [10]. Ezek tehát bizonyos mértékig mozoghatnak is a növekedési lépcsők mentén. Feltételezhetjük azt is, hogy az adszorbeált V atomok és az újonnan érkező U atomok kicserélődnek. Ez a folyamat azt eredményezi, hogy a réteges növekedés lépcsői folyamatosan haladhatnak előre, az összegyűlő adszorbeált V atomokat mintegy sodorhatják magukkal. A V atomok koncentrációja tehát a vándorló lépcsők mentén fokozatosan nő.

A V atomok lépcső menti mozgása koncentrációjuk időszakos helyi változását is létrehozhatja. A növekedési szerkezetet mutató felületről készített felvételek alapján feltételezhető, hogy adott helyen az idegen anyagnak egy stabil, véges kiterjedésű magja, majd szigete jön létre. Ez tovább épülhet újabb V atomok megkötésével. Feltételezve, hogy az  $E_{U/V}$  kisebb, mint  $E_{V/V}$  és  $E_{U/U}$ , az U adatok megkötési valószínűsége ezeken a szigetekeken kisebb lesz, mint a növekedési lépcsők egyéb szakaszain. Így jönnek létre az idegen anyag szigeteinek környezetében a felületen látható bemélyedések (a 7. ábrán az Y-nal jelölt hely).

Gázatomok, mint pl. oxigén atomjainak beépülése esetén a folyamat összetettebb. Jól ismert, hogy az oxigén-atomok a szokásos rétegelőállítási paraméterek mellett nem hozhatnak létre önálló növekedésre képes szilárd fázist. Kezdetben mint adszorbeált atomok vannak jelen [10]. Kötődésükre és mozgásukra az előzőekben leírt folyamat jellemző. Amint azonban azt a 6. és 7. ábra mutatja, új, szigetet alkotó szilárd fázis, a jelenleg közvetlenül még nem bizonyított alumíniumoxid, a növekedési lépcsők mentén kialakul.

Egyes kristályok felületén sajátos szerkezet figyelhető meg (7. ábra): halmok (X) között bemélyedések (Y), amelyeknek falát — a halmok oldalát — lépcsőcsoportok alkotják. A halmok oldalán felismerhetjük az előzőekben leírt kiválásokat, s bemélyedéseket. Ez a felületi szerkezet akkor alakulhat ki, ha a réteges egykristály-növekedés a felületen több forrásból indul ki. Az idegen anyag beépülése a már tárgyalt folyamattal megy végbe, s felhalmozódik a lépcsőkön, majd a lépcsőkkel együtt mozogva egy bizonyos távolság megtétele után, olyan mértékű fedettséget hoz létre a lépcsők mentén, amely a továbbnövekedést már meggátolja. A szomszédos halmok növekedési lépcsőinek találkozása vezet a 7. ábrán látható felületi szerkezet kialakulásához. Hasonló üreges növekedést írt le *Minkoff* és *Nixon* [11] grafit egykristályok esetére szennyezés jelenlétében. A kristályok növekedése során a bemélyedések (Y) és halmok (X) egyre inkább kifejlődnek. Ennek oka az, hogy a szilárd, vagy adszorbeált szennyező réteggel borított oldalfalon az alumínium atomjainak kondenzációs tényezője lecsökken.

A vastag alumínium réteg egykristályainak felületén megfigyelhető halmoknak e sajátos, a határokon oldalirányban gátolt növekedési mechanizmusának leírása átvihető a rétegekialakulás kezdeti szakaszában növekvő különálló egykristályok esetére is. Meghatározó lesz itt természetesen a kristályok orientációja, tehát az, hogy mely kristálylapok vannak egyáltalán abban a helyzetben, amely növekedésüket lehetővé teszi.



### 5. Összegezve

A vékonyrétegeket alkotó kristályok növekedésében a tömbkristályokra jellemző növekedési módok, folyamatok uralkodnak. A réteggialakulás kezdeti szakaszában a növekedés három dimenzióban történik, míg az összefüggő rétegben egy irányban. A jelenlévő idegen anyagok — szennyezők vagy adalékanyagok — atomjainak jelenléte befolyásolja az ideális növekedési mechanizmust. A kristályrácsba be nem épülő anyag atomjai a növekedési rétegek lépcsői mentén halmozódnak fel, azokkal együtt vándorolnak. Felhalmozódásuk eredményeként az idegen anyagnak, vagy az idegen és a réteg anyagának új szilárd vegyület-fázisa stabil szigeteket, majd bizonyos körülmények mellett, összefüggő hátyát alkothat a felnövő kristály lapjait részlegesen, vagy akár a teljes felületet beborítva. Ez a folyamat egyrésztől kiválások létrejöttét jelenti, másrésztől a kristályok felületét beborító s továbbnövésüket gátló záróréteget. Azt, hogy az idegen anyag vagy annak vegyülete kétdimenziós réteget hoz-e létre, vagy háromdimenziós kiválásokban jelenik meg a kristályok felületén, vagy a szemcsehatárokon, a határfelületi energia és az idegen anyag, illetőleg az új fázis diffúziós tulajdonságai határozzák meg. Vizsgálataink eredményeiből megállapítható, hogy a szénhidrogének bomlástermékei, valamint az oxigén és az abból keletkező oxid beépülése a szemcséken belül kiválásokat, illetőleg a szemcsék felületét és a szemcsehatárokat borító hátyát hoz létre, míg nikkel beépülése háromdimenziós kiválásokhoz vezet.

### KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A szerzők köszönetüket fejezik ki *M. F. Reicha* egyiptomi aspiránsnak a kísérleti munkában és az eredmények értékelésében, *Dr. M. Richter* tudományos munkatársnak (Szilárdtestfizikai és Elektronmikroszkópiai Intézet, Halle DDR) a nagyfeszültségű elektronmikroszkópos vizsgálatokban való közreműködésért, *Barcza Gyula*, *Barnáné Raffay Katalin*, *Hajmásy Tiborné* és *Lányi Péter* munkatársaknak a kísérleti munkában és a szerkezetvizsgálatokban nyújtott segítségükért.

### IRODALOM

1. *G. Zinsmeister*, Japan J. Appl. Phys. Suppl. 2. Pt. 1 545, 1974.
2. *D. W. Pashley, M. J. Stowell*, J. Vac. Sci. Technol. 3 156, 1966.
3. *L. S. Palatnik, M. Ya Fuks, V. M. Kosevich*, Mechanizm obrazovaniye i substructura Kondensirovannyh plenok, Nauka, Moszkva, 1972.
4. *J. F. Pócza, Á. Barna, P. B. Barna*, J. Vac. Sci. Technol. 6, 472, 1969.
5. *Barna B. Péter*: Párolagtatott vékonyrétegek kialakulásának elektronmikroszkóppal követhető folyamatai, Kandidátusi Értekezés, Budapest, 1965.
6. *L. E. Murr, M. C. Inman* Phil. Mag. 14, 135, 1966.
7. *J. F. Pócza, Á. Barna, P. B. Barna*; Proc. Coll. on Thin Films, Ed. E. Hahn, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1965. p. 97.
8. *Á. Barna, P. B. Barna, J. F. Pócza*; Proc. Septième Congrès International de Microscopie Electronique, Grenoble, 1970. p. 445.
9. *J. F. Pócza*, Proc. II. Coll. on Thin Films, Ed. E. Hahn, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1967. p. 93.
10. *E. E. Huber, C. T. Kirk*, Surface Science 5, 447, 1966.
11. *I. Minkoff, W. C. Nixon*, J. Appl. Phys. 37, 4848, 1966.







# GaAsP TŰKRISTÁLYOK NÖVEKEDÉSE GŐZFÁZISBÓL

GÖRÖG TAMÁS ÉS LENDVAY ÖDÖN  
MTA Műszaki Fizikai Kutató Intézete, Budapest

## 1. Bevezetés

A tűkristályok vizsgálata a szilárdtestek megismerésében mind a mai napig igen nagy jelentőségű. Bár az utóbbi évtizedben, különösen a félvezető anyagok területén sikerült a tökéletes kristályszerkezetet megközelítő tömb egykristályokat is előállítani, a kristályos anyagok ideális viselkedését az anyagok döntő többségénél még mindig a tűkristályok (whiskerek) közelítik meg leginkább. Az elméleti jelentőség mellett az összetett (ún. kompozit) anyagok előretörésével az elmúlt évtizedben nagy mechanikai szilárdságú szerkezeti anyagokat fejlesztettek ki tűkristály és műanyag, kerámia vagy fém összetett rendszerekből. (Ez az anyagok mechanikai viselkedésének és a kristálynövekedés tanulmányozása mellett sok területen nagy gyakorlati fontosságot is biztosít a tűkristályok képződésére, előállításának tanulmányozására irányuló munkáknak.)

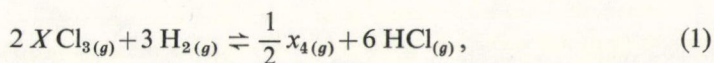
A félvezető anyagok közül optikai és mikrohullámú alkalmazásaik miatt a legdinamikusabban fejlődő terület az  $A^{III}B^V$  vegyületek kutatása. Ezek az anyagok, különösen a GaAs, GaP és egyes ternér vegyületek (pl. a  $GaAs_{1-x}P_x$ ;  $Ga_xAl_{1-x}As$  stb.) ma már a félvezető ipar számottevő alapanyagainak számítanak. Tűkristályok képződéséről a fenti anyagcsaládban eddig elsősorban a GaAs és GaP esetében tudósítottak [1—5], ternér összetételű tűkristályok képződését egyedül GaInAs esetében [4] figyelték meg.

Jelen közlemény a jelenleg legfontosabb  $A^{III}B^V$  típusú ternér vegyület, a GaAsP esetében írja le a tűkristályok keletkezését gőzfázisból.

## 2. Kísérleti leírás

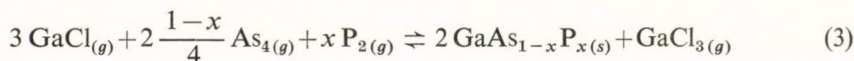
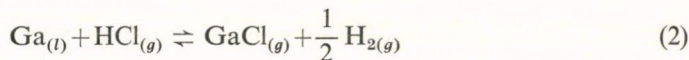
A GaAsP tűkristályok keletkezését gőzfázisból történő epitaxiális (VPE) növesztés során tapasztaltuk. Az epitaxiális növesztés célja kis hibasűrűségű, elektronvezetésű GaAsP réteg felnövesztése volt GaAs hordozókristály (100) laterális felületére. A VPE növesztés alapjait az általunk is használt halogénes transzport esetén GaAs-re Antell és Effer [6] dolgozta ki. A módszert számos anyagra alkalmazták, GaAsP-ra több szerző ismertetett halogénes transzport eljárást [7, 8]. Az általunk használt módszer részletes leírását másutt közöljük [9], főbb vonásai a következők:

A GaAsP növekedése nyitott, gőzfázisú rendszerben összetett, bonyolult kémiai transzportreakció eredménye, melyet röviden a következő reakció egyenletekkel foglaltunk össze:

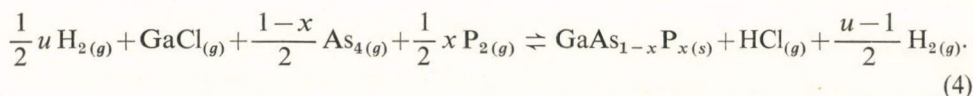




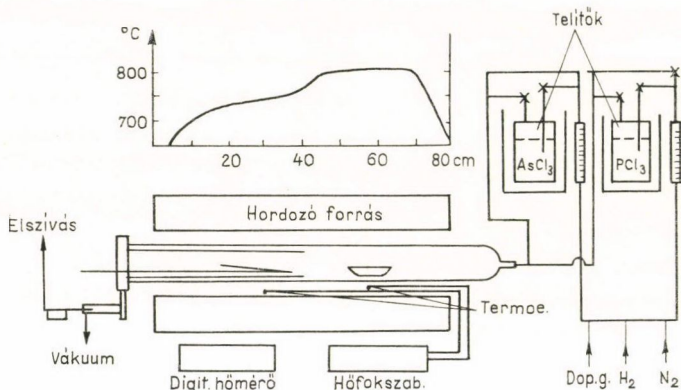
ahol  $x = \text{P, As}$



vagy



A fenti reakciók igen érzékenyek a hőmérséklet, nyomás és koncentráció adatokra, ezért a kristály növekedési viszonyai is (növekedési sebesség, epitaxiás felnövés morfológiája, tűkristályok megjelenése stb.) érzékenyen változik a növesztés paramétereivel (forrás és hordozókristály hőmérséklete, az áramlási sebességek, turbulencia stb.) melyeket szabályozni, ill. program szerint változtatni kell. A növesztő berendezés vázlata az 1. ábrán látható. A reaktortérbe nagytisztaságú  $\text{H}_2$  hordozó gázzal tápláltuk be az V. oszlop elemeinek haloidjait; ezek parciális nyomását az áramlási



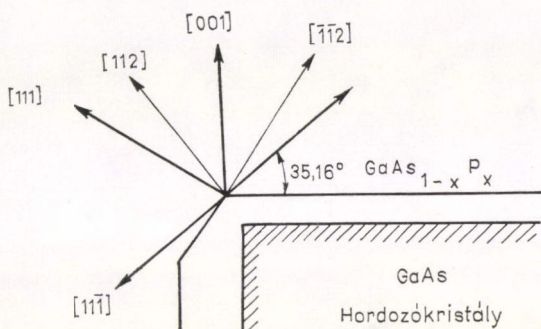
1. ábra.  $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$  epitaxiás felnövesztésére szolgáló berendezés vázlata

sebességekkel és a telítők hőmérsékletével szabályoztuk. A reaktortérben elhelyezett Ga forrás és a hordozókristály hőmérsékletét  $1^\circ\text{C}$  pontosságú MFI hőfokszabályozókkal állítottuk be. A növesztés során a  $\text{PCl}_3$  forrás hőmérsékletét  $-21^\circ\text{C}$ -től  $15^\circ\text{C}$ -ig, az  $\text{AsCl}_3$  forrás hőmérsékletét  $15^\circ\text{C}$  és  $25^\circ\text{C}$  között változtattuk. A Ga forrás hőmérséklete a reaktortérben  $850$ – $900^\circ\text{C}$ , a GaAs hordozókristály hőmérséklete  $760$ – $800^\circ\text{C}$  között változott.



### 3. GaAsP tűkristályok növekedése

GaAsP tűkristályok növekedését általában akkor sikerült megfigyelni, amikor a növesztő rendszer termikusan vagy összetétel szempontjából instabillá vált. A tűkristályok minden esetben a hordozó kristályra felnövő epitaxiális réteg élei mentén helyezkedtek el, a 2. ábrán megjelölt irányoknak megfelelően. A domináns növekedés-irány  $\langle 111 \rangle$  típusú volt. A fenti krisztallográfiai irány a szfalerit rácsban poláros (az

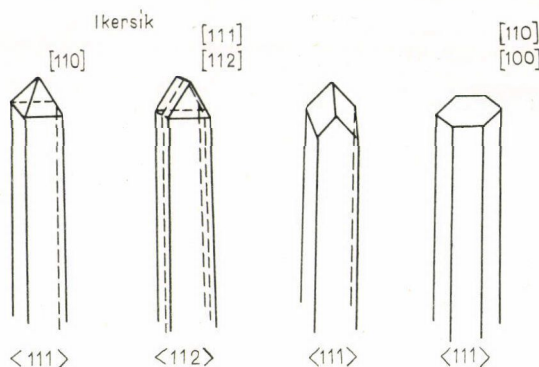


2. ábra.  $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$  tűkristályok orientált felnövekedése GaAs hordozókristály élei mentén

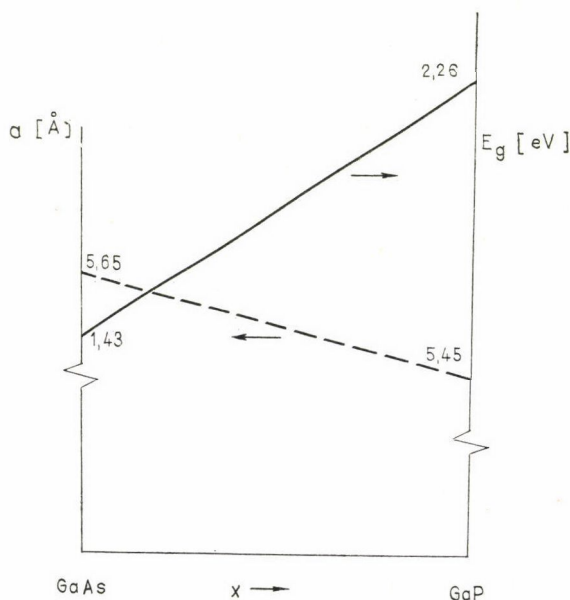
ellentett irányú lappárok között tiszta A, ill. tiszta B atomokkal borított síkok vannak), a vizsgált tűkristályok között túlnyomó többségben a  $[111]$  típusú, Ga felületre normális növekedést tapasztaltunk. Kisebb mértékben megfigyelhető volt  $\langle 112 \rangle$  axiális tűkristályok keletkezése is. A tűkristályok burkoló síkjai a 3. ábrának megfelelően  $\{111\}$ ;  $\{110\}$  és  $\{100\}$  típusúak voltak, a poligonizált oldalsíkok között elsősorban a  $\{110\}$  típusú síkok fordultak elő. Az ábrán bemutatott ikerkristály esetében  $\{112\}$  lapok megjelenése is megfigyelhető volt, az utóbbi kristály gyakran nem tű, hanem néhány  $\mu\text{m}$  vastag szallag formájában nőtt fel a hordozóra. A tűkristályt lezáró borítólapokat gyakran fém Ga cseppecske borította, ami az  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$  vegyületek esetében már korábban megfigyelt VLS (vapor—liquid—solid) növekedési mechanizmusra utalt [1, 4]. A VLS növekedés során a gáztérből a növekedést megszabó anyagtranszport nem közvetlenül a szilárd felületre, hanem a tűkristály csúcsát borító olvadt fém felületére irányul. (Az olvadt fém felülete gyorsabban „nyeli” el a gáztérből érkező anyagot, mint az egyébként jóval nagyobb szilárd kristályfelület.) Az olvadék-oldatból a kristály anyaga a fémmel borított csúcson válik ki, ezért a növekedés axiális irányú és tűkristályok keletkeznek [10]. A kristályok méretei azt mutatták, hogy a fenti GaAsP tűkristályoknál az axiális irányú növekedés sebessége  $10^3$ – $10^4$ -szerese volt az oldalirányú növekedésnek. A Ga-ot csak rövid whiskereken sikerült kimutatni, a hosszú tűkristályokat a 3. ábrán bemutatott borító síkok zárták le. Ennek valószínűleg az az oka, hogy a reaktorban radiálisan inhomogén volt a HCl koncentráció, a hordozó kristály környezetében alacsony. Ha a tű csúcsa elhagyta a HCl-ben elszegényedett zónát a (2) reakciónak megfelelően a Ga lemaródott a tűkristály csúcsáról. Ilyen esetben ha a kristály tartalmaz axiális csavardiszlokációt, tovább nőhet a Frank mechanizmusnak megfelelően.



A rendszer kémiai természete lehetővé tett további érdekes megfigyeléseket is. A kristályok többségén észlelhető volt, hogy a tűkristály egy sötét, a kristály hosszának 70—90%-án végigvonuló magot tartalmaz. Ismeretes, hogy a  $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$  rácsállandója, tilos sávja és ezzel együtt optikai abszorpciója is folytonosan változik a Vegard szabálynak megfelelően a GaP és GaAs összetételek között. A 4. ábrán ezt a változást tüntettük fel. Jól látható, hogy a GaAs (és a kis P tartalmú  $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ ) a látható fényt teljesen abszorbeálja, míg a nagy P tartalmú vegyületek a színekép



3. ábra.  $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$  tűkristályok jellegzetes morfológiája és fő növekedési irányai



4. ábra. A rácsállandó és a tilos sáv szélességének változása a GaP-GaAs rendszerben



látható tartományában átlátszóak. A tűkristályok „magjának” összetétele a fentiek alapján jelentősen eltért a borító palást (és természetesen a hordozókristályra felnövekedő laterális réteg) összetételétől. Összevetve a fenti megfigyelést a fém Ga megjelenésével, a tűkristályok keletkezésére a következő lehetséges magyarázat adódik:

Az epitaxia megindulásakor a hordozó kristály hőmérsékletének ingadozása és a relatív alacsony anyagtranszport miatt mód van a felület termikus bomlására. Kimutatható, hogy a  $A^{III}B^V$  vegyületek esetén a termikus lepárolgás nem kongruens, a felületen Ga dúsul fel, mivel gőznyomása még magas hőmérsékleteken is igen alacsony. Ez a folyamat GaP és GaAs esetében mikroszkópos Ga cseppek megjelenéséhez vezet [11]. A Ga cseppek részben a bomlási sebesség orientációfüggése, részben a Ga migrációja és akkumulációja miatt elsősorban az élek mentén, a mikroszkopikus  $\{111\}$  lapok mentén jelennek meg. A cseppek a VLS mechanizmushoz szükséges nukleációs helyként hatnak. A whiskerek sötét magja egyértelműen mutatja, hogy a hossznövekedés döntően az epitaxiás növesztés megindulásakor játszódik le. A folyamat igen gyors, mivel a tűkristály belseje vagy tiszta GaAs, vagy ehhez közeli összetételű  $GaAs_{1-x}P_x$ . A magas As tartalom részben a GaAs bomlásából származó magas As parciális nyomásra, részben az epitaxiás folyamat beállítását megelőző alacsony  $PCl_3$  (ill.  $P_2$ ) parciális nyomásra vezethető vissza. A stationer állapot beállásakor a felületet gyorsan beborító  $GaAs_{1-x}P_x$  bomlási hőmérséklete már magasabb, ezért újabb Ga képződése nem lehetséges, és a VLS göcök keletkezése megszűnik. A folyamat korai szakaszán kifejlődött vékony tűkre a gáztérből a makroszkópos összetételnek megfelelő (lényegesen magasabb P tartalmú)  $GaAs_{1-x}P_x$  réteg válik le. Ez adja a tűkristályok mélyvörös, átlátszó palástját.

#### IRODALOM

1. R. L. Barus és W. C. Ellis, J. Appl. Phys. 36, 2296, 1965.
2. A. Addamiano és J. E. Davey, J. Cryst. Growth 10, 194, 1971.
3. A. Addamiano, J. Cryst. Growth 11, 381, 1971.
4. E. I. Givargizov, J. Cryst. Growth 31, 20, 1975.
5. J. Kasahara, K. Kajiwarra és T. Yamada, J. Cryst. Growth 38, 23, 1977.
6. G. R. Antell és D. Effer, J. Electrochem. Soc. 106, 509, 1955.
7. W. F. Frisch és E. W. Mehal, J. Electrochem. Soc. 111.
8. H. Huber és G. H. Winstel; Siemens Forsch. and Entwickl. Ber. 3, 35, 1974.
9. T. Görög és E. Lendvay, Acta Phys. Hungar. 44 13, (1978).
10. K. S. Wagner és W. C. Ellis, Appl. Phys. Letters 4 89, 1964.
11. S. Kocsis és E. Lendvay, Krist. und Technik 9 1131, 1974.







# ALKALIHALOGENID KRISTÁLYOK NÖVEKEDÉSI FORMÁINAK STABILITÁSA

HARTMANN ERVIN

MTA Kristályfizikai Kutatólaboratórium

Gyulai Zoltán professzor munkásságának jelentős részét tette ki az alkalihalogenid kristályok növekedési formáinak vizsgálata. A jelen munka Gyulai professzor munkáihoz csatlakozva az utóbbi években egyre nagyobb gyakorlati jelentőségre szert tevő morfológiai stabilitás oldaláról vizsgálja a növekedési formák kérdését.

A NaCl típusú alkalihalogenid kristályok egyensúlyi alakja a Stranski—Kajsev-elmélet szerint a kocka alak [1]. Közismert, hogy vizes oldatból az alkalihalogenidek legtöbbször valóban kocka vagy ahhoz közel álló alakban kristályosodnak ki. Ez azonban csak arra mutat, hogy ezekben az esetekben a kristályok az egyensúlyi helyzethez közeli feltételek mellett nőttek, kicsi volt a túltelítés. *Csernov* számítása szerint [2] ugyanis a kristály növekedési formája akkor egyezik meg az egyensúlyi alakkal, ha a kémiai potenciálkülönbség:

$$\Delta\mu \ll \frac{\Omega \cdot \alpha}{L} \quad (1)$$

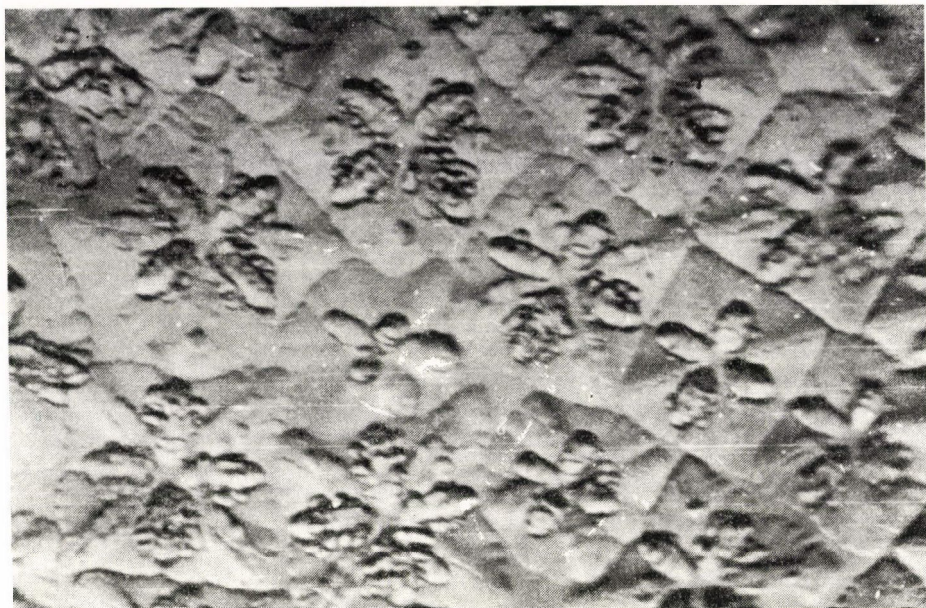
ahol  $\Omega$  a beépülő ion fajlagos térfogata,  $\alpha$  a felületi feszültség,  $L$  a kristály mérete.

Ha az (1)-es feltétel nem teljesül, a kristályok növekedési formája eltérhet az egyensúlyi alaktól. Az érintkező fázisok térfogataiban lejátszódó hő- és anyagtranszport folyamatok valamint a fázisok érintkezési felületein lejátszódó anizotrop molekuláris folyamatok a legkülönbözőbb növekedési formákat eredményezhetik. Például gömb alakú NaCl-kristályok keletkeznek NaCl-olvadék gyors megszilárdulásakor [3]. Olvadékból történő dendrites növekedésnél lekerekített formák jelennek (1. ábra) meg, ahol a belső lekerekített dendritágak  $\langle 100 \rangle$  irányúak. NaCl dendritnek szoba-hőmérsékleten vékony oldatrétégből történő kikristályosodásakor viszont az egyenes vonalak az uralkodóak, mint ezt a 2. ábra mutatja. Jól látható, hogy ebben az esetben a dendrites növekedés a  $\langle 110 \rangle$  irányban haladt előre. Ha a kristályok oldatból igen gyorsan, kb.  $0,1 \text{ mm sec}^{-1}$  sebességgel nőnek, akkor a lapok növekedése erősen elmarad az élek növekedésétől, s csak a kristály váza, szkelettje alakul ki. Szkelettes KBr-kristályokat mutat a 3. ábra. Speciális növekedési forma a tűkristályos forma is, melynek jelentőségére *Gyulai Zoltán* professzor az elsők között hívta fel a figyelmet [4, 5].

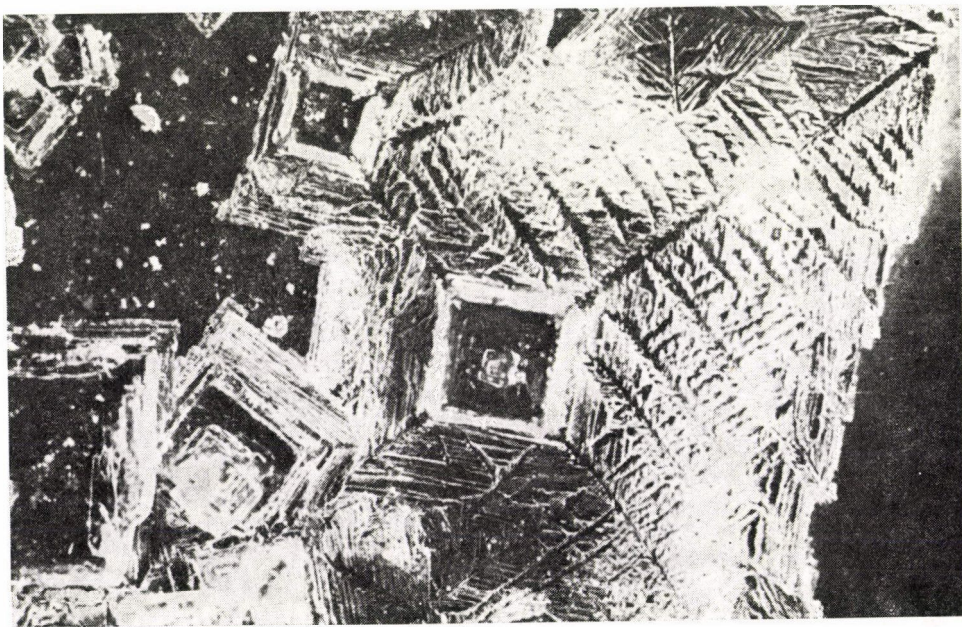
A fentebb felsorolt növekedési formák a fő típusokat reprezentálják, melyekre további szép példák *Gyulai* [4—10], illetve *Turchányi* [11, 12] munkáiban találhatók.

A növekedési formák általában nem stabilak. A gömb alakú kristályok az olvadékban kezdetben alakjukat megtartva nőnek. Amikor azonban átmérőjük eléri a 30—50 mikront, akkor rajtuk tartósan megmaradó kidomborodások keletkeznek,



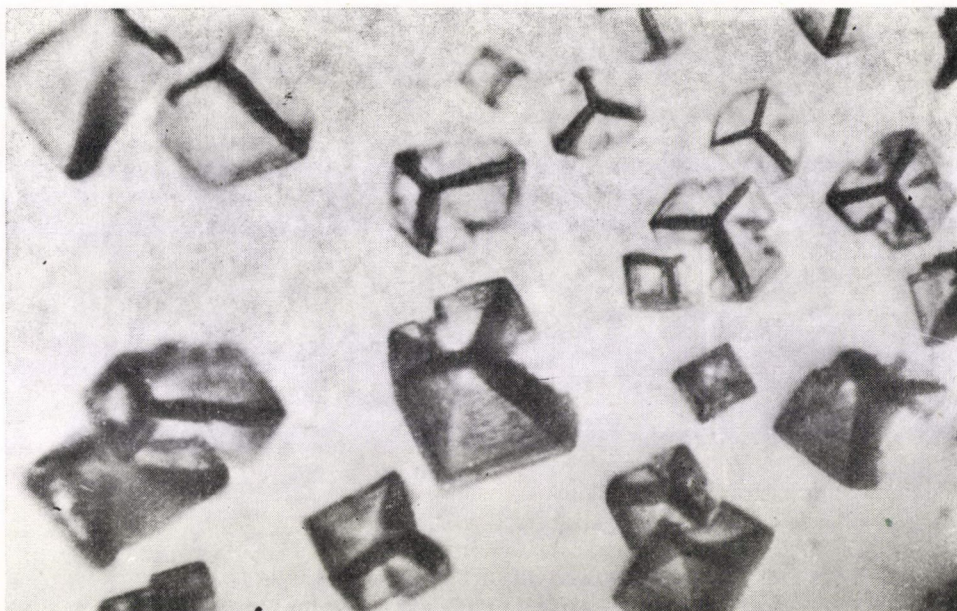


1. ábra. Dendritek NaCl-olvadék felszínén. Nagyítás:  $80\times$

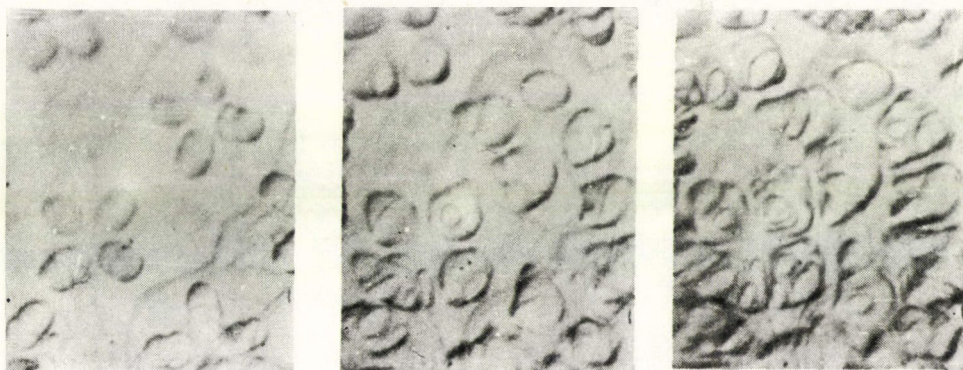


2. ábra. Vékony oldatrétegből nőtt NaCl dendritek. Nagyítás:  $3\times$





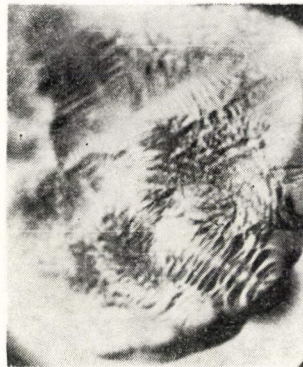
3. ábra. Oldatban nőtt KBr skelettkristályok. Nagyítás: 30×



4. ábra. Dendritek kialakulása NaCl-olvadékban. Nagyítás: 120×

melyek következtében az eredetileg gömb alakú kristály málnaszemre emlékeztető alakot vesz fel. A lekerekített dendrites formák is változtatják alakjukat a növekedés során. Mint a negyedik ábrán látható filmkockák mutatják, a növekedés során a  $\langle 100 \rangle$  irányokban kicsúcsosodnak és egyre differenciáltabbakká válnak. Az első ábrán látható dendrites kristályszemcsék szélének csipkézettsége a szemcsék teljes összenövése után általában eltűnik. A skelettes kristályoknál megnyilvánul egy olyan tendencia, hogy a növekedés végén kitöltődjenek. Hasonló tapasztalható dendritek esetében is.

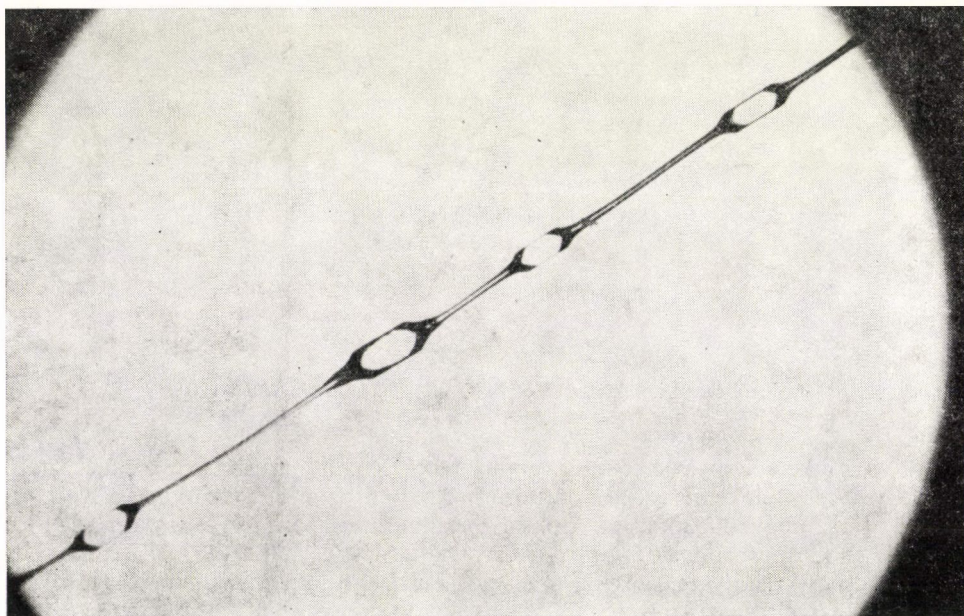




5. ábra. Olvadékból nőtt NaCl dendrit kitöltődése a növekedés végén. Nagyítás: 20×

Az ötödik ábrán látható két filmkocka összehasonlítása azt mutatja, hogy hogyan változik egy NaCl dendritcsoport olvadékból történő növekedés végén.

A már kialakult növekedési formák részbeni leépülését követő növekedés szintén a növekedési formák átalakulásával jár. NaCl tűkristályt változó nedvességű légtérbe helyezve, a tűkristály egyes részei elvékonyodnak, más részei megvastagodnak (6. ábra). A differenciálódás olyan mértékű lehet, hogy a tűkristály egyedi, az egyensúlyi formához közelebb álló kristályokra esik szét. Hasonló jelenség megfigyelhető



6. ábra. NaCl tűkristály átkristályosítása. Nagyítás: 10×



polivinilalkoholos oldatban növesztett túkristályoknál is, ha őket hosszú időn (hónapokon) keresztül az oldatban hagyjuk. A hőmérsékletingadozások hatására át-kristályosodási folyamat indul meg. A túkristályok eltűnnek az oldatból, helyettük kocka alakú kristálykák jelennek meg, bár a polivinilalkohol-szennyezés továbbra is oldatban van. Gyakran tapasztalható az a jelenség is, hogy nem-egyensúlyi formához tartozó kristályfelületek felszíne feldurvul, rajta olyan mikrofelületek alakulnak ki, melyek az egyensúlyi formához tartoznak.

A növekedési formákkal, valamint stabilitásukkal kapcsolatos megfigyelések elméletileg jól magyarázhatók.

Csernov kimutatta [2], hogy a stacionárius növekedési formákat épp úgy meg lehet szerkeszteni a Wulf szabály alapján a növekedési sebesség irányfüggéséből, mint a kristályok egyensúlyi formáját a felületi feszültség irányfüggéséből. Ha a növekedési sebesség anizotrópiája éles minimummal rendelkezik, akkor a növekedési forma poliéder lesz, ha viszont a növekedési sebesség irányfüggése folytonos görbével jellemezhető, a stacionárius növekedési formáknak lekerekítettnek kell lenniük. Így módon értethetővé válik a gömb alakú kristályok, valamint az 1 és 4-es ábrákon látható lekerekített növekedési formák megjelenése. A tapasztalataink az elméletnek azzal a következményével is összhangban vannak, hogy a lekerekített formák magas hőmérsékleten, tiszta olvadékból történő növekedéskor keletkeznek, hiszen nyilvánvaló, hogy magasabb hőmérsékleten a növekedési sebesség anizotrópiája elmosódottabb.

A lekerekített formáknak dendritte alakulása magyarázható a morfológiai stabilitás Mullins és Sekerka által megalapozott elméletével [13]. Ezen elmélet szerint egy gömb alakú kristály növekedése során bizonyos méret elérése után elveszíti morfológiai stabilitását. A gömbön keletkező apró kinövések növekedési sebessége különbözni fog az alapfelület növekedési sebességétől, és az eredetileg gömb alakú kristály dendritté kezd alakulni. Coriell és Parker számításai [14] szerint a maximális méret,elynél a gömb alakú kristály elveszti morfológiai stabilitását, a következő képletből számítható ki:

$$R_a = \frac{1}{2} R^* \left[ 1 + \frac{1}{2} (l+2)(1+Kl) \right] \cdot A \quad (2)$$

$$A = 1 + \sqrt{1 + \frac{2(l+2)(1+Kl) \cdot k_L}{\left[ 1 + \frac{1}{2} (l+2)(1+Kl) \right]^2 \cdot R^* \cdot Q \cdot \beta}} \quad (3)$$

$$R^* = \frac{2 \cdot T_M \cdot \alpha}{Q(T_M - T)} \quad (4)$$

$$K = 1 + \frac{k_s}{k_L} \quad (5)$$

ahol  $R^*$  a kritikus kristálymag mérete,  $Q$  a fagyáshő,  $\beta$  a növekedési sebességgel arányos kinetikus koefficiens,  $T_M$  az olvadási hőmérséklet,  $k_s$  és  $k_L$  a kristály, illetve az olvadék hővezetőképessége,  $l$  a perturbáció harmonikusának száma,  $\alpha$  a felületi feszültség.

Coriell és Parker a (2) képlet alapján egy morfológiai stabilitását elvesztítő dielektromos gömbkristály méretére 20  $\mu$ -os becslést ad. Ez az érték jó egyezésben van a



kísérleteinkben a gömbkristályok maximális átmérőjére kapott 30–50  $\mu$ -os mérési eredményekkel.

Mint a hármas képletből látható, a morfológiai stabilitását elvesztő kristály mérete függ a kritikus kristálymag méretétől. A kritikus kristálymag mérete viszont, mint a kristálymag-képződési elméletből ismeretes, a túlhűtéssel fordítottan arányos ([4]-es képlet). Ez az elméleti eredmény összhangban van azon megfigyelésünkkel, hogy a túlhűtés növelésével a dendritte történő átalakulás valószínűsége nő. Arra, hogy a lekerekített formáknál az első perturbációk miatt a  $\langle 100 \rangle$  irányokban jelennek meg, *Coriell* és *Parker* elmélete nem tud feleletet adni, mivel nem veszi figyelembe a kinetikus koefficiens irányfüggését.

Az anizotrop felületi kinetikát poliéderez formák stabilitásánál *Csernov* vette figyelembe, amidőn a szekeletes formák keletkezésének elméletét dolgozta ki [2, 15]. Kimutatta, hogy mennél nagyobb a diffúziós együttható, mennél kisebb a kristályfelületen lejátszódó elemi folyamatok sebessége, illetve mennél nagyobb ezen sebességek az irányfüggése, annál nagyobb méretet tud elérni a kristály, megtartva tökéletes poliéder formáját. Ez összhangban áll azzal a megfigyelésünkkel, hogy a 3. ábrán látható szekeletes formák nagy növekedési sebességeknél jöttek létre, olyan oldatban, melyet nem kevertünk, *Csernov* elméletében is fellép egy maximális méret, melyet elérve a kristály poliéderez formából szekeletes formába megy át. A diffúziós állandóra  $10^{-5}$   $\text{cm}^2 \text{sec}^{-1}$ -et, a kinetikus együtthatóra  $10^{-4}$   $\text{cm sec}^{-1}$ -et tételezve fel *Csernov* a maximális méretre  $10^{-2}$  cm értéket ad [16]. Ez az érték megfelel az általunk mért szekeletfalak néhány tized milliméteres vastagságának.

A szekelett és dendrites formák kitöltődésének magyarázata a külső feltételek megváltozásában keresendő. A növekedés végén a túltelítettség, ill. túlhűtés általában csökken, abba a tartományba jut, amelyben az (1)-es feltétel már teljesül, s így a kristály növekedési formája közel kerül az egyensúlyi formához. Hasonló alapon értelmezhető a túlkristályok átalakulása és a nem egyensúlyi kristályfelület leépülése is.

#### IRODALOM

1. B. Honigmann, Gleichgewichts- und Wachstumsformen von Kristallen, Darmstadt, 1958.
2. A. A. Csernov, B. Ja. Ljubov, Roszt krisztallov 5, 11, 1965.
3. E. Hartmann, Roszt krisztallov, 9, 126, 1972.
4. Z. Gyulai, Zeitschr. f. Physik 125, 1, 1948.
5. Z. Gyulai, Zeitschr. f. Physik 138, 317, 1954.
6. Z. Gyulai, Zeitschr. f. Kristallographie A 91, 142, 1935.
7. Z. Gyulai, Acta Phys. Hung. 1, 199, 1952.
8. Z. Gyulai, Acta Phys. Hung. 10, 371, 1959.
9. Z. Gyulai, Zeitschr. f. Phys. Chemie, 217, 428, 1961.
10. Z. Gyulai, phys. stat. sol. 8, 511, 1964.
11. Gy. Turchányi, Krisztallográfia, 7, 290, 1963.
12. Gy. Turchányi, T. Horváth, I. Tarján, Roszt krisztallov 5, 206, 1965.
13. N. W. Mullins, R. F. Sekerka, J. Appl. Phys. 35, 444, 1964.
14. S. R. Coriell R. L. Parker. Proc. Internat. Conf. Crytal Growth, Boston 1966, p. 703, Pergamon Press, Oxford, 1967.
15. A. A. Csernov, Krisztallográfia, 8, 499, 1963.
16. A. A. Csernov, Krisztallográfia, 16, 842, 1971.



# MEGFIGYELÉSEK A LAVINASZERŰ KRISTÁLYKÉPZŐDÉSEL KAPCSOLATBAN\*

MALICKÓ LÁSZLÓ

MTA Kristályfizikai Kutatólaboratórium

Dr. Gyulai Zoltán akadémikus,  
mélyen  
tisztelt Tanítómesterem emlékének  
ajánlom.

KBr és egyéb anyagok túlhűtött vizes oldataiban a mechanikai behatásra bekövetkező kristályképződési folyamatokat *Gyulai* sokoldalúan vizsgálta. A folyamatok alatt jellegzetes lemez, tű, csavart tű és kocka alakú kristályképződési stádiumokat figyelt meg [1—4]. Jelen munka az előbbiekhez csatlakozóan az egyes, eltérő külalakú kristályok képződési sebességének idő- és túltelítettségfüggésére vonatkozó vizsgálatok eredményeit ismerteti. A kísérleti eredmények értelmezését ismert kristálymag-képződési elméletek és cluster ütközéses modell segítségével kíséreljük meg.

## 1. Bevezetés

A tűkristályok különleges, a tömbkristályokénál mintegy százszor nagyobb szakítási szilárdságára elsőként Gyulai hívta fel a figyelmet az 1950-es évek elején [5, 6]. Szokatlan mechanikai tulajdonságuk következtében ettől kezdve a tűkristályok — növekedési körülményeik és tulajdonságaik — iránt egyre szélesedő érdeklődés nyilvánult meg (lásd pl. [7—11]).

A túltelített KBr- ill. NaCl-oldatban mechanikai behatással kiváltott, ún. „lavinyszerű” kristályképződés nem utolsósorban mint újszerű tűkristály előállítási mód keltette fel *Gyulai* figyelmét [1—3]. Jelen dolgozatban az ő vizsgálataihoz kívánunk néhány részletkérdésben kiegészítést nyújtani. Mielőtt azonban erre rátérnénk, célszerű az előzményeket röviden áttekintenünk.

## 2. Előzmények

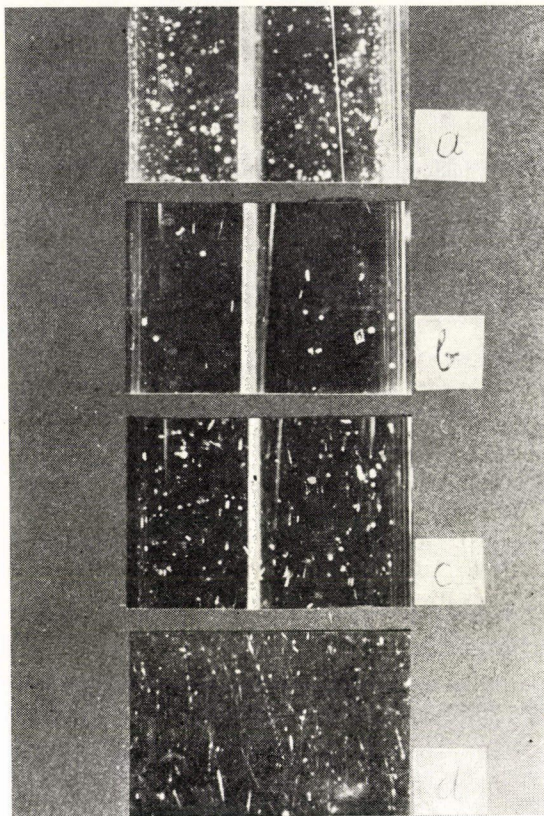
### 2.1. Gyulai alapkísérlete: „lavinyszerű” kristályképződés [1—3].

Üveg ampullába zárt, kb. 70 °C-on telített, kb. 75—80 °C hőmérsékletű, mintegy 300 g-nyi KBr vizes oldatot hűlni hagyjuk. Az oldatban kb. óra nagyságrendű megfigyelési idő alatt csak mintegy 20 °C vagy annál nagyobb túlhűtés, azaz kb. 50 °C és az alatti hőmérsékleteknél figyelhetünk meg *spontán* kristálykiválást, kristályképződést. A kristályképződés aztán az oldatban időközben bekövetkezett anyagfogyás, túltelítettség-csökkenés következtében az esetleges további lassú hűlés ellenére gyakorlatilag megszűnik. A spontán kialakult, kb. mm méretű KBr-kristályok *kocka* alakúak. Ez a növekedési alak a Curie—Wulff-elvből elméletileg várható *egyensúlyi* kristályalaknak felel meg.

\* *Gyulai Zoltán* akadémikus születésének 90. évfordulójára rendezett MTA emlékülésen, 1977. december 7-én elhangzott előadás alapján.



Ha a spontán kockaképződés lecsengése után az ampullát megrázzuk vagy megütögetjük, az előzőekben keletkezett kristályokon *kívül* újabb kristályok képződését figyelhetjük meg. Maga az a tény, hogy a mechanikai behatás metastabil túltelített oldatban rohamos kristályképződést vált ki, már régóta ismert volt [12—13]. Az új azonban az, hogy ezen képződési folyamat során a keletkezett kristályok *külalakja* szerint több stádiumot lehet megkülönböztetnünk (lásd 1. ábrát).



1. ábra. Pillanatképek túltelített KBr vizes oldatban mechanikai behatással kiváltott lavinaszerű kristályképződés egyes stádiumairól (eredeti méret). a) kocka, b) lemez, c) tű és d) csavart tű (pontsorok!) külalakú kristályokra

A mechanikai behatás után követlenül, viszonylag rövid ideig *kocka* alakú kristályok képződnek (1a. ábra). A kockaképződés lecsengésével egyidejűleg *lemez* alakú kristályok kialakulása indul meg (1b. ábra) és válik jelentékennyé. A lemezképződés lecsengésével egyidejűleg *tű* alakú kristályok keletkezése indul meg (1c. ábra), felszorzorozódik — mintegy „lavinaszerűen” —, majd lecseng. A tűkeletkezés lecsengésekor gyakran megfigyelhetők hossz tengelyük körül *csavarodott tűk*, melyek visszavert fényben pontsorokként tűnnek fel (1d. ábra).



A fenti, mechanikai hatással kiváltott, a kockától eltérő alakokat is mutató, intenzív kristályképződést nevezte Gyulai „lavinaszerű” kristályképződésnek. A jelenséget egyéb alkálihalogenidek, valamint egy sor egyéb kristályanyag esetében is kvalitatíven reprodukálhatónak találta [4].

## 2.2. Elméleti áttekintés a kristálymagképződésről

Mielőtt az újabb kísérletek ismertetésére térnénk, célszerű lesz még nagy vonásokban a magképződésre vonatkozó elméletekről is említést tennünk.

Ismeretes, hogy telítettség körüli, ill. túltelített termodinamikai rendszerekben a heterofázisú fluktuációk következtében a rendszer részecskéi különböző méretű komplexeket — újabb szóhasználat szerint — clustereket is képeznek. Az anyafázisban ezen clusterek már az új fázist képviselik [14, 15].

A telítettséghez közeli, ill. túltelített állapotú rendszer — a továbbiakban konkrétan *oldat* — tehát egyedi részecskék (szimbólumuk:  $A_1$ ) és különböző méretű —  $g$  számú egyedi részecskéből összetett — clusterek (szimbólumuk:  $A_g$ ) összessége. A clusterek mérete egyedi részecskék csatlakozása és leválása, azaz  $A_{g-1} + A_1 \rightleftharpoons A_g$  alakú bimolekuláris reakciók, útján változhat. Clusterek egymással egyesülési folyamatát az elméletek elhanyagolhatónak tekintik.

Egy  $g$  részecskéből álló cluster kialakulása a rendszer

$$\Delta\Phi = -\Delta\mu g + \alpha g^{2/3} \quad (1)$$

termodinamikai potenciálváltozásával jár együtt, ahol  $g=1, 2, \dots$

$$\Delta\mu = kTS \quad (2)$$

egy részecskének az anyafázisból clusterhez csatlakozásakor bekövetkező kémiai potenciálváltozás,

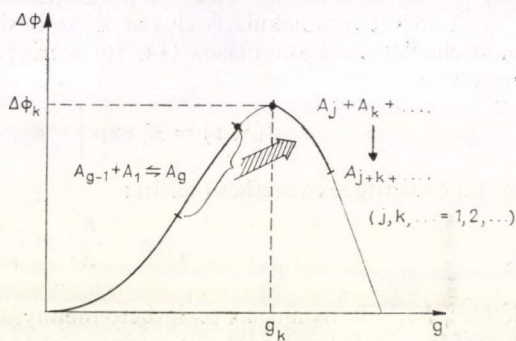
$k$  — Boltzmann állandó,  $T$  — abszolút hőmérséklet,

$S = \ln c/c_\infty$  — logaritmusos túltelítettség,  $c$  — aktuális és

$c_\infty$  — telítettségi koncentráció

$\alpha$  — a specifikus felületi energiával arányos faktor.

A  $\Delta\Phi$  termodinamikai potenciálváltozás  $g$  részecskeszám függését a 2. ábrán vázoltuk. A



2. ábra. Cluster képződés okozta  $\Delta\Phi$  termodinamikai potenciál-változás  $g$  méretfüggésének vázlatos menete. A vastag sátozott nyíl az elméletekben figyelembe vett clusterképződési reakcióktól *eltérő*, clusterütközéses esetekre utal

$$\frac{\partial \Delta\Phi}{\partial g} = 0 \quad (3)$$



feltételnek megfelelő  $g_k = \left(\frac{2}{3} \frac{\alpha}{\Delta\mu}\right)^3$  szélsőérték hely olyan kritikus méretet jelöl, melynél a clusterok továbbnövekedése energianyereséges, és spontán megy végbe. Az ilyen méretű vagy ennél nagyobb clusterok az ún. *kristálymagok*. A

$$\Delta\Phi_k = \frac{4}{27} \frac{\alpha^3}{\Delta\mu^2} \quad (4)$$

szélsőérték az ún. *magképzési munka*. A kristálymagok mérete általában olyan kicsi (10...1000 Å), hogy közvetlenül *nem*, csak a *belőlük kifejlődött kristálykák láthatók*. Ezért az előzőekben és a továbbiakban is a kísérletekkel kapcsolatosan következtetéseink *kristályképződésről* beszélünk *magképződés helyett*.

A vázolt bimolekuláris cluster képződési modell alapján itt részletezni nem kívánt elméleti megfontolások [14, 16] szerint a heterogén, tranziens magképződés sebességére

$$I(S, t) = K_1 \exp\left\{-K_2 t - \frac{\tau}{t}\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{K_3}{S^2}\right\} \quad (5)$$

alakú összefüggés vezethető le. Itt:

$$\frac{K_3}{S^2} \equiv \frac{\Delta\Phi_k}{kT} \quad (6)$$

jelölés,  $K_1$  — konstansnak tekinthető mennyiség,  $K_2$  — az anyafázisban meglevő magképződési centrumok időbeli fogyása miatt a folyamat lecsengésére jellemző állandó, ahol  $K_2=0$  a homogén magképződésnek felel meg,  $\tau$  — a magképződés „felfutására” jellemző időállandó,  $t$  — az idő. Az (5) egyenlet fenti alakjából a magképződési sebesség idő- ill. túltelítettségfüggése, mely későbbi tárgyalásunk témája, szembetűnő.

### 3. Kísérletek

Ezen elméleti megfontolások után ejtsünk néhány szót az újabb, módosított kísérletekről. Láttuk, hogy Gyulai eredeti kísérleteiben az oldat magképződési elmélet szempontjából fontos paraméterei — mint pl.: oldathőmérséklet, túltelítettség — a folyamat bonyolultsága miatt (előzetes, spontán kristályok jelenléte, folyamatos hűlés) nem voltak mérhetőek. Ezért úgy módosítottuk a kísérleteket, hogy egy-egy lavina folyamat előtt *előzetes* kristályok jelenlétét elkerültük és így a kezdeti túltelítettség meghatározható volt, a kvantitatívan is kiértékelt esetekben közel állandó is maradt a folyamat alatt. A hőmérsékletet is — a lehetőségekhez képest — állandó értéken tartottuk a folyamat alatt.

A kísérleteket a korábbiakhoz hasonlóan ampullákba zárt, különböző telítettségű hőmérsékletű KBr vizes oldatokon végeztük. Az oldat hőmérsékletét két (hideg-meleg) ultratermosztátra átkapcsolható vízfürdővel szabályoztuk. Négy, kb. 300 ml-es üvegampullát használtunk  $T_0$ :  $(76,5 \pm 0,5)$ ,  $(70,0 \pm 0,3)$ ,  $(53,2 \pm 0,2)$  és  $(46,6 \pm 0,2)$  °C telítési hőmérsékletű oldattal. A hőmérsékleteket az ampulla mellett elhelyezett hőmérővel mértük. Az elrendezés max.  $\pm 0,3$  °C hőmérséklet kontrollt, kezdeti túltelítettség-meghatározást, vizuális és egyéb optikai megfigyelés lehetőségét biztosította.



A kontroll mérések szerint az oldat és vízfürdő hőmérséklete  $\max \pm 0,3^\circ\text{C}$ -ra megegyezett. Extrém számosságú kristályképződések esetétől eltekintve a latens kristályosodási hő — hőkiáramlást kizártnak tekintve is — csak  $1^\circ\text{C}$ -nál kisebb hőmérséklet-emelkedést okozhatott volna.

A hőkezelés a következő lépésekből állt:

- a) A telítési hőmérséklet felett kb.  $10^\circ\text{C}$ -kal, az ampulla időnkénti megrázása mellett, oldás a „meleg” termosztát segítségével;
- b) A teljes oldás után 10 percig hűntartás.
- c) A kívánt kristályosodási hőmérsékletre az előre beállított „hideg” termosztáttal lehűtés és itt hűntartás;
- d) A 10. percben az ampullát, tartójából kiemelve megráztuk. A mechanikai behatás (rázás) olyan túltelítettségeknél történt, melyeknél spontán kristályok még *nem* voltak az oldatban.

Kontroll mérések szerint ez a rázási aktus  $\pm 0,1^\circ\text{C}$ -nál nagyobb hőmérsékletváltozással nem járt. Megfelelő egyéb eszközök híján maradtunk a Gyulai eredeti kísérletei szerinti kézzel történő rázásnál. Előzetes begyakorlás után — a rázás kb. 1/sec frekvenciával, kb. 10 cm amplitúdóval történt. A kontroll próbák szerint az ettől eltérő, kézzel egyáltalán realizálható frekvenciájú és amplitúdójú rázások lényeges eltérést nem okoztak. Így a kézi rázás bár kevésbé definiált, a kristályképződési folyamatok összehasonlító vizsgálatát nem zárta ki, mint ezt a reprodukálhatóság igazolta is.

e) Rázás után az oldat viselkedését (buborékok, kristályok képződését, áramlásokat stb.) megfigyeltük:

*vizuálisan*, ha a keletkezett kristályok száma csekély volt;

*mikrofotográfias* módszerekkel, ha a kristályok száma nagy volt.

A kvantitatív kiértékelésnél felhasznált esetekben a kristályosodási folyamat alatt kivált anyag mennyisége elhanyagolható volt az oldatban maradt többletanyag mennyiségéhez képest. Így a túltelítettség kezdeti értéke a KBr oldékonyság ismert hőmérsékletfüggéséből [17] számítható volt és a folyamat alatt az állandónak volt tekintendő.

#### 4. Eredmények és diszkussziójuk

A fentiek után rátérhetünk a mérési eredményeink rövid ismertetésére.

##### 4.1. Kristályképződési folyamat időbeli lefolyása

Állandó  $T$  hőmérsékleten és  $S$  túltelítettség mellett a mechanikai behatás utáni  $t$  időpontban  $\Delta t$  rövid időszakasz alatt  $V$  térfogatban keletkező kristályok számát  $N(\Delta t)$  leszámolva a  $t$  időpillanathoz

$$I(t) = \frac{N(\Delta t)}{V \Delta t} \quad (7)$$

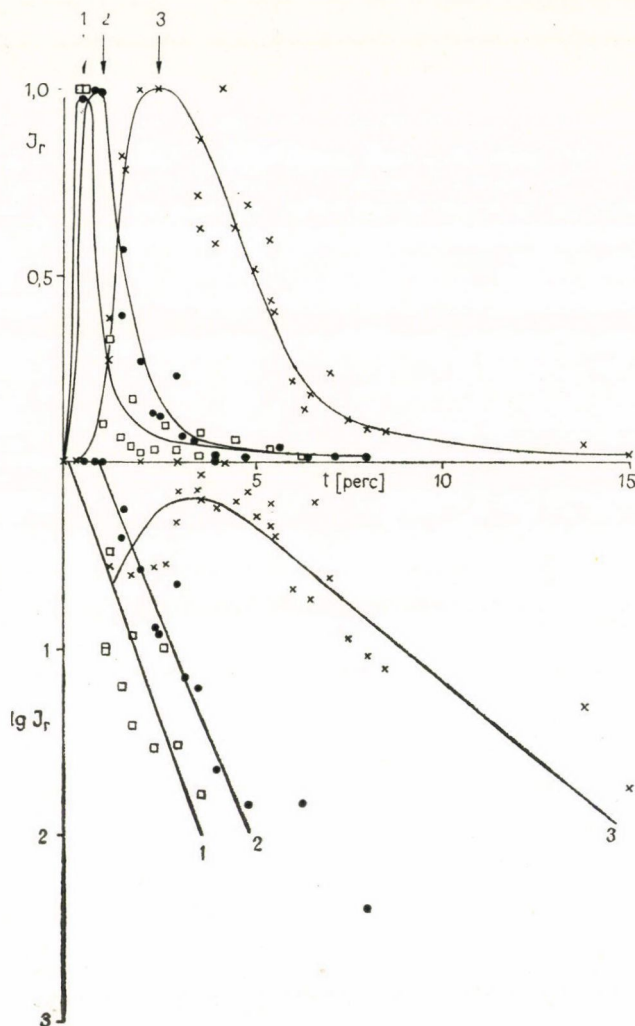
egyenlet szerint egy pillanatnyi kristályképződési sebességet lehet meghatározni. A magképződési sebességre látott (5) összefüggés szerint  $\ln I(t)$  menete

$$\ln I(t) = K_4 - K_2 t - \frac{\tau}{t} \quad (8)$$

alakú, ahol  $K_4 \equiv \ln K_1 - K_3/S^2$  állandó.



A lavinákban kockák, lemezek, tűk általában egyidejűleg szerepelnek. Viszonylag kis tútelítettségek, azaz viszonylag kis képződési sebességek esetén az egyes kristályalakokra a képződési folyamatuk időbelisége jól szétválasztható volt. A 3. ábrán egy jellegzetes példát látunk erre:  $T=28,8^\circ\text{C}$ -on,  $S=0,12$  tútelítettségu oldatban végbement lavina esetére, amikor is a képződési sebesség viszonylag kicsi volt, de mindhárom külalak előfordult. A függőleges tengelyen a relatív képződési sebességet  $t$  n-tettük fel 1, 2, 3 jelzés szerint kocka, lemez és tű alakra. Látszik, hogy a kocka és



3. ábra. Az  $I_r$  relatív képződési sebesség (ill.  $\lg I_r$ )  $t$  időfüggése a különböző, (1)  $\square$  kocka, (2)  $\bullet$  lemez és (3)  $\times$  tű alakú kristályokra.



lemez alakú kristályokra a folyamat felfutási ideje és lecsengési ideje egyaránt kicsi a tűkristályokéhoz képest.

Az ábra alsó felén látható logaritmikus ábrázolás jól mutatja, hogy a kristályképződés mindhárom külalak esetén jó közelítéssel a magképződési elmélet szerinti (8) egyenletnek megfelelő menetű.  $K_2$  zérustól különböző volta pedig arra utal, hogy a folyamat a heterogén magképződéssel analóg jellegű. Az egyes külalakokra „szelektív” kristályképző centrumok kb. 20 perc alatt felhasználódtak, a folyamat lecsengett.

#### 4.2. A kristályképződési sebesség túltelítettség függése

A lavinabeli kristályképződés időbeli lefolyását tárgyalva azt láttuk, hogy a különböző külalakok megjelenési sorrendje: kocka  $\rightarrow$  lemez  $\rightarrow$  tű — *Gyulai* megfigyeléseivel megegyezően. Meg kell azonban jegyeznünk, hogy mindez csak akkor van így, ha mindhárom külalak egyáltalán megjelenik, éspedig, ha a túltelítettség nem túl kicsi. Ha a telítettségtől ( $S=0$ ) kiindulva egyre nagyobb túltelítettségeknél indítjuk meg a kristályképződést, azt tapasztaljuk, hogy a túltelítettség értelmében véve „először” a lemez, ill. tű és végül a kocka külalak jelenik meg. Megfigyeléseink szerint a lemez  $7,7 \cdot 10^{-2}$ , a tű  $8,0 \cdot 10^{-2}$  relatív túltelítettség alatt, a kocka  $9,6 \cdot 10^{-2}$  felett domináns külalak.

A lavina folyamat a mechanikai behatást követő  $t_l$  idő múlva gyakorlatilag teljesen lecseng. Leszámálva ezen lecsengési idő alatt  $V$  térfogatban keletkezett kristályok számát  $N(t_l)$ , egy adott túltelítettséghez

$$\bar{I}(S) = \frac{N(t_l)}{V t_l} \quad (9)$$

egyenlet szerint egy időfüggetlen átlagos kristályképződési sebességet határoztunk meg. A magképződési sebességre vonatkozó (5) egyenletből  $K_1 \exp\left\{-K_2 t - \frac{\tau}{t}\right\} \equiv K_5$  jelöléssel

$$\ln \left[ \frac{K_5}{\bar{I}(S)} \right] = \frac{K_3}{S^2} \quad (10)$$

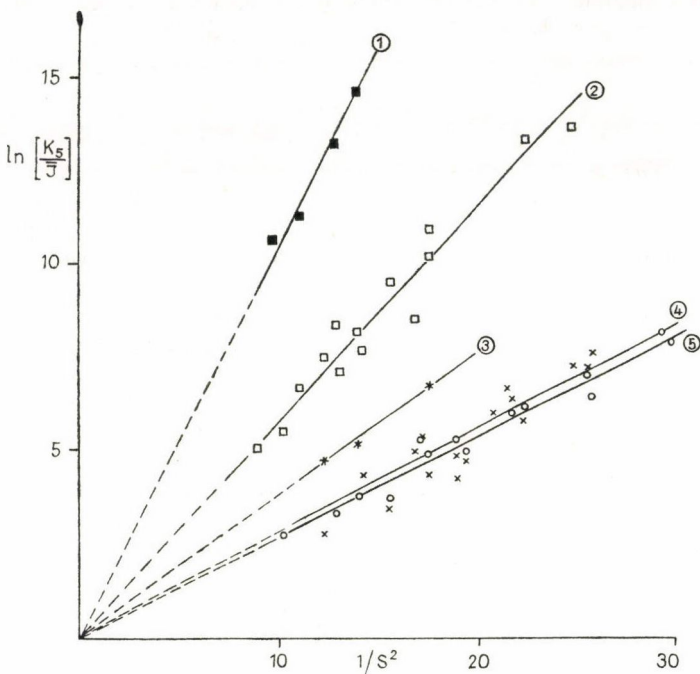
alakú összefüggéshez juthatunk.

Extrém esetektől eltekintve az egyes kristályalakokra a keletkezési sebesség túltelítettségfüggése szétválasztható volt. A mérési eredményeket a 4. ábrán mutatjuk be a (10) összefüggésnek megfelelő  $\ln \left[ \frac{K_5}{\bar{I}} \right] - 1/S^2$  alakban. Az egyes görbék — itt éppen egyenesek — jelzés szerint: 1 — spontán kockákra, 2 — lavina kockákra, 3 — csavart tűkre, 4 — tűkre és 5 — lemezekre vonatkoznak.

Az ábrából látható, hogy a kristályok képződési sebességének túltelítettségfüggése a magképződési elmélet szerinti (10) összefüggésnek tesz eleget, az egyenes  $K_3$  meredeksége a külalaktól függ. A meredekség legnagyobb a spontán kockákra és lavina kocka  $\rightarrow$  csavart tű  $\rightarrow$  tű  $\rightarrow$  lemez irányban csökken. Az utóbbi kettő között az eltérés igen kicsi. Érdekes és további tisztázásra vár a spontán és lavina kockák meredekségében mutatkozó igen jelentékeny eltérés.



Mint érdekességet, megjegyezzük, hogy a meredekség — azaz a termodinamikai potenciál változás! — külalakfüggése, melyet *oldatban* végbemenő kristályosodásra nyertünk, kvalitatíve egyezésben van szilárd anyafázisban precipitátumok keletkezésére elméletileg számolt termodinamikai potenciál változás külalakfüggésével. [18].



4. ábra. Az  $I$  átlagos kristályképződési sebesség  $S$  túltelítettség függése

$$\ln \left[ \frac{K_s}{I} \right] - 1/S^2 \text{ formában: (1) (spontán keletkezett) kocka,}$$

(2) (lavinabeli) kocka, (3) csavart tű, (4) tű és (5) lemez alakú kristályokra

#### 4.3. Modell a lavinaszerű kristályképződésre

Láttuk, hogy mechanikai behatásra olyan túltelítettség tartományban indul meg kristályképződés, ahol a spontán kristályképződés sebessége — gyakorisága — igen kicsi, gyakorlatilag zérus. Azaz az elméletben figyelembe vett és a 2. ábra bal oldalán feltüntetett reakciók szerint  $g \cong g_k$  clusterok viszonylag rövid megfigyelési idő alatt *nem* keletkeznek.

Elképzelhető azonban, hogy a mechanikai behatásra elegendően nagy, de a kritikusnál kisebb méretű clusterok kétszeres vagy többszörös ütközésével, melyet az elméletek spontán magképződésnél elhanyagolhatónak tartanak, — a 2. ábra jobb oldalán feltüntetett reakciók szerint — „mesterségesen” keletkeznek kritikusnál nagyobb méretű *extra clusterok* bizonyos számban. Ez a modell egy lehetséges magyarázatot szolgáltat az észlelt kristályképződésre, hiszen az extra clusterok a heterogén magképző-



désnél szereplő idegen anyagú magképző centrumokkal analóg szerepet játszanak. Ezen extra clusterek látható méretűvé növekedése szolgáltatja a lavinaszerű kristályképződéshez a megfigyelt kristálykákat. Érthető tehát, hogy a lavinaszerű kristályképződés a heterogén tranziens magképződéssel analóg időfüggést mutat, mint azt a 4.1. fejezetben láttuk.

Más irányú vizsgálatok eredményeit is figyelembe véve a cluster-ütközéses modell segítségével a nem-egyensúlyi kristályalakok (lemez, tű, csavart tű) is értelmezhetőeknek tűnnek.

In situ elektronmikroszkópos vizsgálatok szerint [19, 20] kristályszemcsék egyesülésekor a következő esetek fordulnak elő: az egyesült, egymáshoz viszonyítva dezorientált szemcsék között szemcsehatár v. diszlokáció maradhat, ill. ezek a szemcsék átorientálódása útján eltávozhatnak.

Csavardiszlokációkon, ill. csavarkomponenst is tartalmazó szemcsehatárokon tűkristályok kialakulása elméletileg várható [21] és ezt makrokristályokon meg is figyelték [22].

Feltételezzük most egyszerűség kedvéért, hogy az oldatban létrejövő spontán clusterok kocka alakúak. Ha bármilyen reakcióban vagy ütközés révén diszlokációmentes, vagy mindhárom térirányban kb. azonos feltételeket biztosító, hibás extra cluster keletkezik, ez legnagyobb valószínűség szerint izometrikusan nő tovább, *kocka* alakú kristályt eredményez. Ha az ütközéssel egybeállt extra cluster dezorientáció miatti diszlokációs hibák következtében főleg egysíkú növekedésre képes, *lemez alakú* kristályt eredményez. Ha csak egy egyenesbe eső növekedés kitüntetett, *tűkristály* nő ki. Ha még az egyirányú növekedést kitüntető diszlokáció Burgers-vektora *nagy* is, *csavart tűk* alakulnak ki [22].

## 5. Összefoglalás

Összefoglalásul a következőket mondhatjuk. Kissé módosított, definiáltabb körülmények között reprodukáltuk a Gyulai-féle lavina kísérleteket. A mérési eredményeket a magképződési elméletekkel összevetve megállapítottuk, hogy a lavinaszerű kristályképződési folyamat a heterogén, tranziens magképződéssel analóg folyamat. Ebben az egyes — lemez, tű, csavart tű — kristályalakokra „szelektív” magokat a mechanikai behatás hozza létre. A „szelektív” magok kialakulásának magyarázatára kvalitatíve jónak tűnő, a magképződési elméletekben elhanyagolt cluster ütközésen alapuló modellt ismertettünk. Ezzel, reméljük némileg hozzájárultunk a Gyulai-féle lavinaszerű kristályképződés és általában a kristályképződés mélyebb megismeréséhez.

## KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A szerző köszönetét fejezi ki dr. Cseh Szombathy Lászlónénak, Vannayné Morlin Évának, dr. Kiss Józsefnének és Farkas Mihálynének a kísérleti munka különböző fázisaiban nyújtott segítségükért. A szerző hálás köszönete illeti dr. Hartmann Ervint a kézirat alapos megvitatása során nyújtott hasznos tanácsaiért.



## IRODALOM

1. Z. Gyulai, Acta Phys. Hung. 10, 371, 1959.
2. Z. Gyulai, Roszt Krisztallov 3, 98, 1961.
3. Z. Gyulai, phys. stat. sol. 7, 511, 1964.
4. Gyulai Zoltán a jelzett téma vizsgálatával — a szerző tudomása szerint — az 1950-es évek közepétől 1968-ban bekövetkezett haláláig foglalkozott. Az 1964-ig terjedő publikációi KBr-on és NaCl-on végzett vizsgálatok eredményeit tartalmazzák. A vizsgálatokban annak idején jelen dolgozat szerzője is részt vett. Tudomása van arról, hogy a lavinaszerű kristályképződési folyamatok vizsgálatát Gyulai több homológ vegyület sorra is kiterjesztette és sok esetben a publikáltakkal analóg folyamatokat figyelt meg.
5. Gyulai Z., Magyar Fiz. Folyóirat 2, 371, 1954.
6. Z. Gyulai, Z. f. Phys. 138, 317, 1954.
7. F. R. N. Nabarro, P. J. Jackson, Growth and Perfection of Crystals. Ed. by R. H. Doremus et. al. John Wiley and Sons. New York. 1958. 13—101 old.
8. W. Borchardt-Ott, W. Kleber, Zs. f. phys. Chem. 211, 79, 1959.
9. E. M. Nadgornij, A. V. Sztepanov, Fiz. Tverd. Tela 3, 1068, 1961.
10. B. Jeszenszky, E. Hartmann, Krisztallográfia 7, 433, 1962.
11. Z. Gyulai, Zs. f. Phys. 176, 370, 1963.
12. H. A. Miers, F. Isaac (1906, 1907) lásd H. E. Buckley: Crystal Growth. (Orosz kiad. Moszkva. 1954. 17. old.)
13. G. W. Sears, J. chem. Phys. 29, 979, 1958.
14. J. L. Frenkel, Kinetische Theorie der Flüssigkeiten. Deutsch. Verl. d. Wiss. Berlin. 1957. VII. fejezet.
15. R. L. Parker, Solid State Physics. Acad. Press. New York. 1970. Vol. 25. 199. old.
16. J. Gutzow, S. Toschew: Krist. u. Techn. 3, 337, 485, 1968.
17. Handbook of Chemistry and Physics. 18<sup>th</sup> Ed. Chem. Rubber Publ. Co. Cleveland. 1933. 748. old.
18. Horváth A., Kohászai Fizikai Kémia. Budapest. 1961. 246—251. old.
19. J. F. Pócza, Proc 2<sup>nd</sup> Coll. on Thin Films. 1967. 93. old.
20. J. F. Pócza, Á. Barna, P. B. Barna, I. Pozsgai, Gy. Radnóczy, Jap. J. of Appl. Phys. Suppl. 2, Part 1. 1974. 525. old.
21. W. Burton, N. Cabrera, F. Frank, Phil Trans. A 243, 299, 1951.
22. Jeszenszky B., Hartmann E, Magy. Fiz. Folyóirat 10, 183, 1962.



# KÍSÉRLETEK SZILÁRD FÁZISÚ KRISTÁLYNÖVEKEDÉSI FOLYAMATOK KÖRÉBŐL

MORLIN ZOLTÁN

MTA Kristályfizikai Kutató Laboratórium

A dolgozat egyes szilárd fázisú növekedési folyamatok vizsgálatára kétféle kísérlettypust ismertet. Míg az egyik a vizsgált folyamatok átlagolt menetét tárja fel, addig a másik típusú kristálynövekedési kísérletsorozat részfolyamatokat vizsgál. Első közelítésben alkalmazható a diffúziós magképződési és növekedési elmélet, a folyamatok finomszerkezetének vizsgálata azonban arra utal, hogy részleteiben, szubmikroszkopikus szinten, nem csak ez a mechanizmus érvényesül.

## 1. Bevezetés

Az alábbi folyamatokat tárgyaljuk:

1. Deformált polikristályos tantállemezek hőkezelés indukálta szemcseméret-növekedése;

2. Cd-fém kiválása CdS egykristályokban; egy- és kétegyértékű szennyezők precipitációja NaCl-ban;

3. Egyes polimorfok (CsCl, CsI, TlI,  $\text{NH}_4\text{I}$ , egyes ferroelektromos kristályok) fázisátalakulása.

Kétféle kísérleti módszert alkalmaztunk. Az egyikbe olyan mérések tartoznak, melyek a vizsgálni kívánt folyamatok átlagolt menetéről adnak információt, a második típusú kísérletsorozat viszont részfolyamatok feltárására alkalmas.

## 2. Átlagolt folyamatok

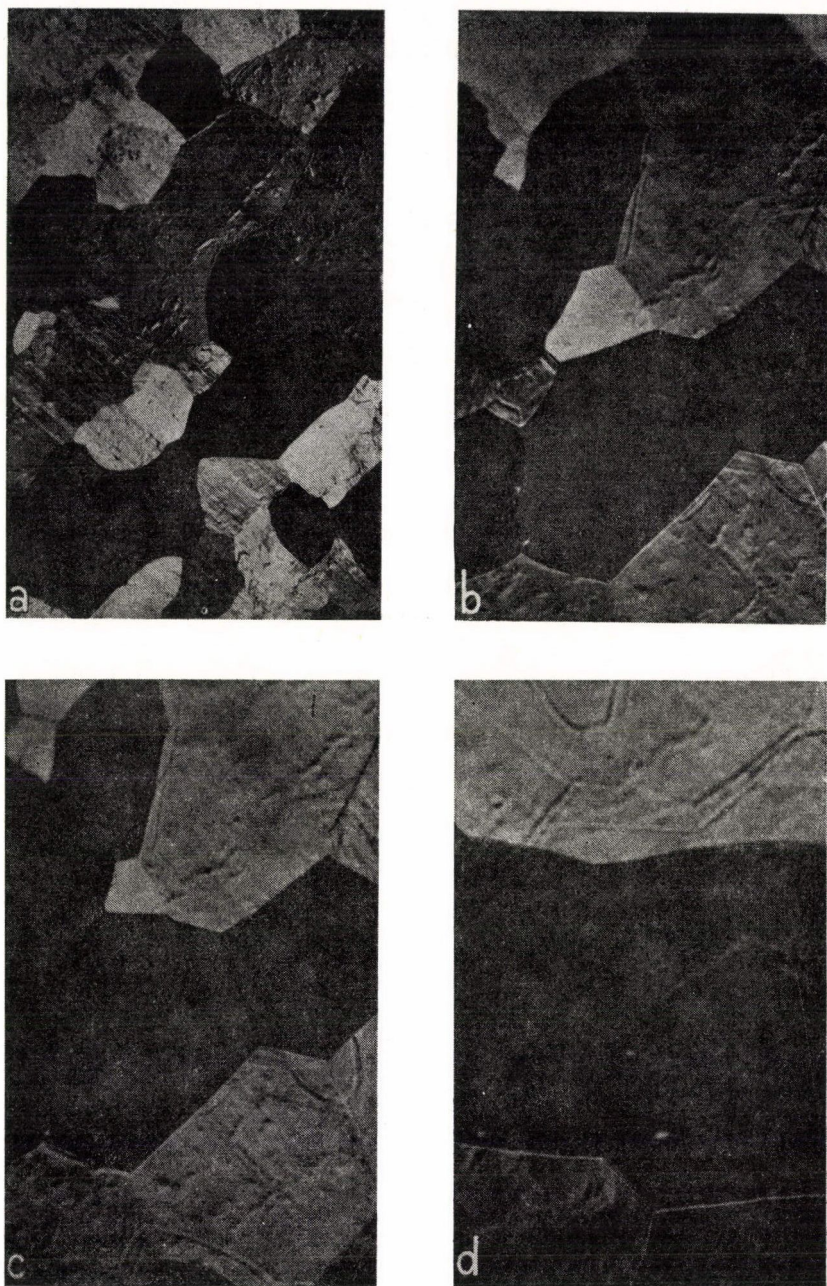
Ebben a kategóriában az egyes kísérleti módszerek a következők voltak:

Hengerelt polikristályos tantálpróbák átlagos időfüggő szemcseméret-növekedésének vizsgálata Zeiss gyártmányú EF—6 elektronoptikai berendezéssel (termikus elektronemisszióval) 1000 °C hőmérsékleten. [1]. Az 1. ábra példaképpen az egyik kísérletsorozat négy mikrogramját mutatja be, a kiindulási állapotot, a folyamat végállapotát és két közbűlső helyzetet. Nagyszámú felvétel értékelése a 2. ábrában látható görbét eredményezte.

Hasonló eredményeket szolgáltatott CdS egykristályokkal végzett ún. feketedési kísérletsorozat [2]. A kristályokból vízgőz és UV sugárzás hatására fém kadmium válik ki. A folyamat nyomon követése fénymikroszkóppal történt, a három fázist a 3. ábra szemlélteti. Közvetlen szemcseszámlálás vagy a kristályok fényreflexiójának mérése a 2. ábrában bemutatott típusú függvényt eredményezett.

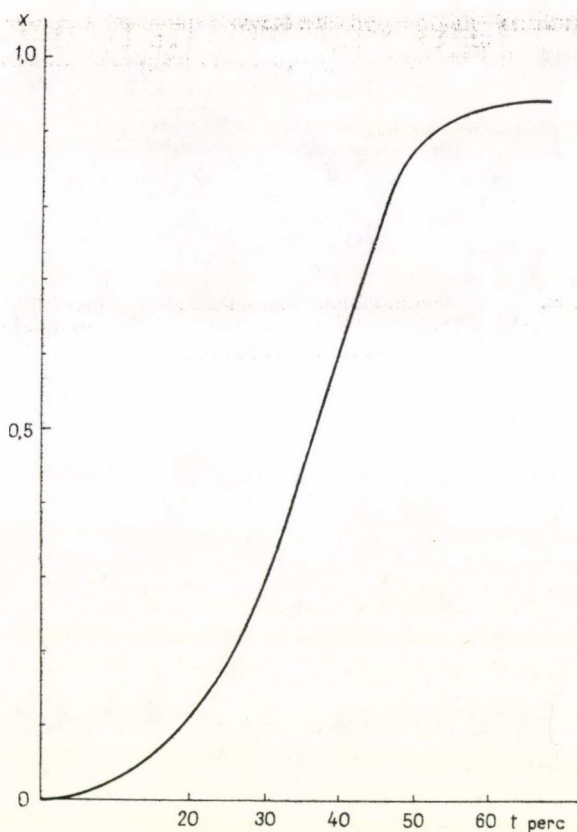
Polimorf kristályok szilárd fázisú kristálynövekedésként értelmezhető fázisátalakulásának közvetlen mérése valamilyen diffrakciós módszerrel valósítható meg.





1. ábra. Polikristályos tantálszemcsék növekedése 1000 °C-on. a) kezdőállapot, b) 5 perc után, c) 20 perc után, d) végállapot. A felvételsorozat Zeiss EF-6 emissziós elektronmikroszkóppal készült, termikus elektrongerjesztéssel. Nagyítás:  $13\,000\times$  [1.]





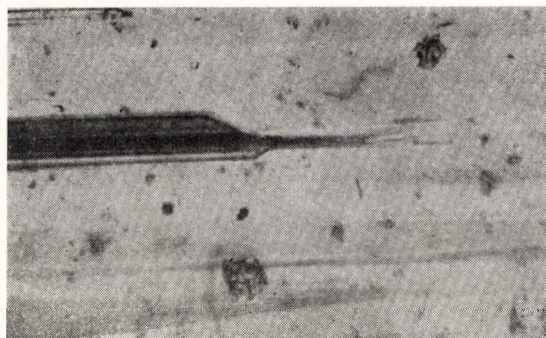
2. ábra. Tantálszemcsék megnövekedett  $x$ -törtreszének izotermikus  $t$ -idő függése. Hőmérséklet:  $1000^\circ\text{C}$ . [1].

Precíziós elektrondiffrakciót célszerű alkalmazni, mivel a rövid, 1–2 másodperces expozíciós lehetőség miatt a folyamat minden részletét egyszerre, nagyobb számú reflexión lehet tanulmányozni, egy-egy folyamatról, annak minden fázisáról sok felvétel készíthető, s a kísérletek könnyen reprodukálhatók. A precíziós elektrondiffrakció polikristályos párologtatott vékony rétegek vizsgálatára alkalmas, az elektrondiffrakciós módszer eredményei azonban nem különböznek lényegesen a Debye–Scherrer röntgendiffrakciós módszer eredményeitől [3].

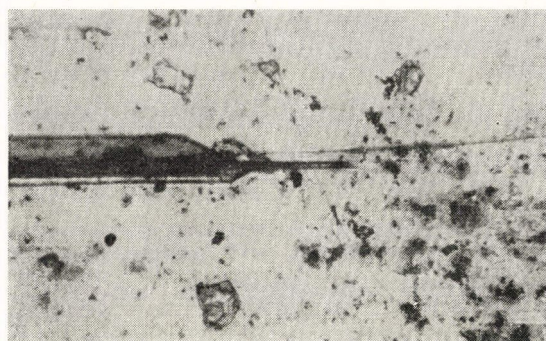
A 4. ábra precíziós elektrondiffraktogramja a CsCl  $\text{Pm}3\text{m} \rightarrow \text{Fm}3\text{m}$  fázisátalakulásának három lépését (kiindulás, vegyes fázis, magas hőmérsékletű fázis) mutatja be.

A fázisátalakulás vizsgálatának egy másik igen érzékeny módszere a fajlagos elektromos vezetőképesség hőmérséklet-függésének mérése az átalakulási hőmérséklet-tartományban. Az 5a ábrában zónázott TII egykristályon mért diagram látható  $\ln \sigma = \ln A - B/T$  ábrázolásban [4]. A  $\text{Pmcm} \rightleftharpoons \text{Pm}3\text{m}$  (ortorombos  $\rightleftharpoons$  CsCl típusú) átalakulást a fajlagos elektromos vezetőképesség jelentős változása indikálja. A fajlagos





a)



b)

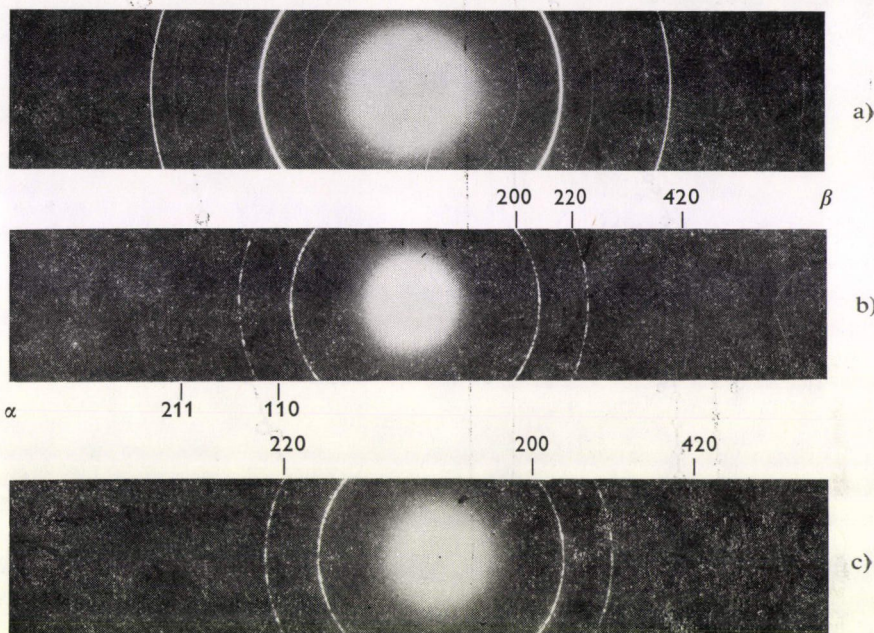


c)

3. ábra. Fém-Cd kiválása CdS egykristályfelületen. a) 3 perc UV besugárzás után, b) 10 perc UV besugárzás után, c) 20 perc UV besugárzás után. A felvétel Reichert ME-F reflexiós mikroszkóppal készült, nagyítás:  $240\times$  [2].



vezetőképesség a már átalakult térfogat  $x$ -tört részévé kétfázisú aggregátumok effektív elektromos vezetőképességének meghatározására levezetett formulák valamelyikének segítségével könnyen átszámítható [5], [6]. Az átszámítás eredményét TII-ra az 5b ábra mutatja be. Hasonló eredményre vezettek CsCl-al és  $\text{NH}_4\text{I}$ -al végzett elektromos vezetőképességmérési kísérletek is [7], [8].



4. ábra. CsCl fázisátalakulásának precíziós elektrondiffrakcióval felvett diffraktogramja. a)  $\text{Pm}3\text{m}$ ,  $\alpha$ -fázis, b) vegyes fázis, c) magas hőmérsékletű fázis ( $\text{Fm}3\text{m}$ ,  $\beta$ -fázis). (Vegyes fázis  $\alpha$  és  $\beta$  együttes jelenléte.) A diffraktogramok Zeiss EF-5 elektronoptikai berendezéssel készültek. Precíziós elektrondiffrakciós és röntgendiffrakciós adatok nem térnek el lényegesen (Morlin Z. „Über die Messgenauigkeit der Elektro- nenbeugung. Feingerätetechnik, 21, 1977, 1972 és [3]).

A megnövekedett, precipitált, illetve fázisátalakulás során struktúrát (tércsoportot) váltott térfogattörtrészek idő-, illetve (vezetőképességmérések esetén) hőmérsékletfüggő változásának alakjából arra lehet gondolni, hogy szóban levő folyamatok Avrami, Johnson és Mehl formális kinetikájával értelmezhetők [9]. Eszerint a szilárd fázisú kristálynövekedés diffúziós folyamat, melyet az alábbi egyenlettel lehet leírni

$$\ln \frac{1}{1-x} = k \cdot t^n,$$

ahol  $x$  = a növekedett (illetve kivált, átalakult) törtrész

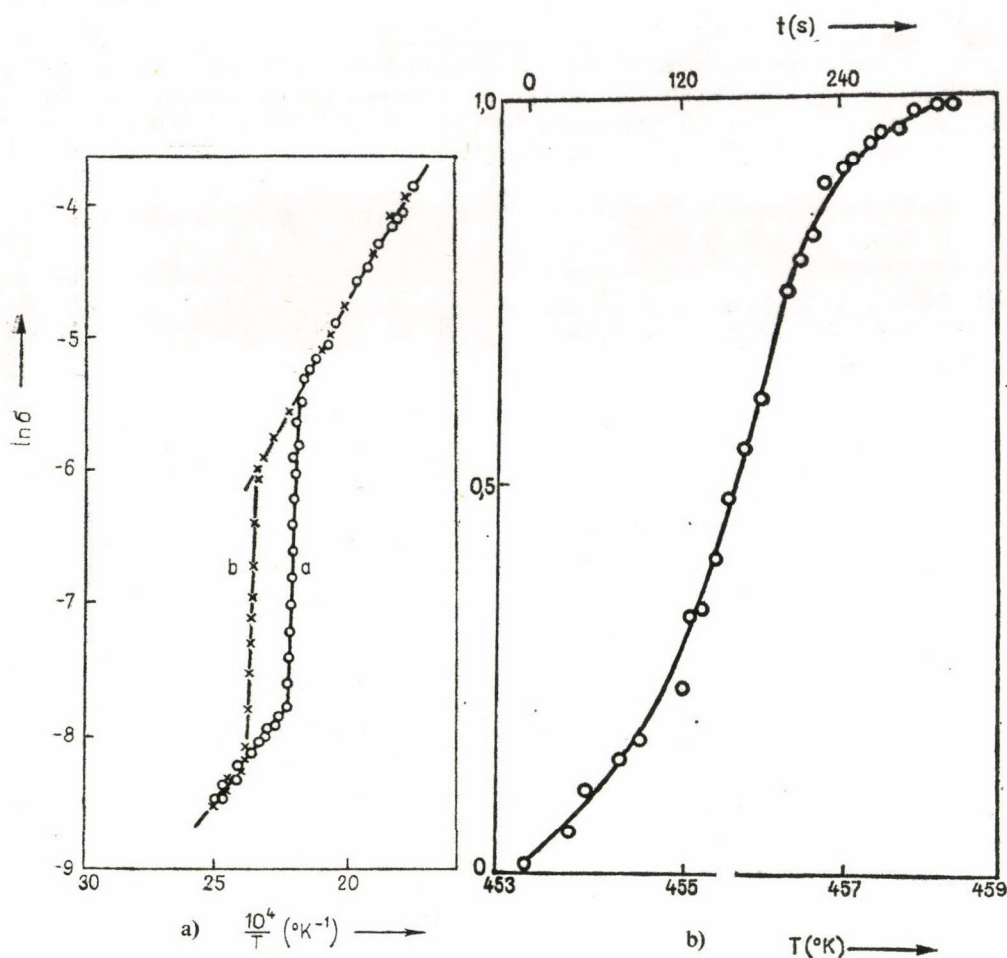
$k$  = sebességek konstans

$t$  = idő

$n$  = a magképződés dimenziójára és sebességére jellemző mennyiség.

Fenti egyenlet konstans hőmérsékletre vonatkozik, de változó hőmérsékletre is alkalmazható, ha a hőmérsékleti program az idő lineáris függvénye ( $T = a \cdot t$ ). A 2. és





5. ábra. a) zónázott TII egykristály fajlagos elektromos vezetőképességének hőmérsékletfüggése  $\ln \sigma = \ln A - B/T$  ábrázolásban. A mérés emelkedő a), majd süllyedő b) hőmérsékleten történt.

b) A TII vezetőképességmérési adatokból számolt  $x$ -átalakult törtrészének hőmérséklet- illetve időfüggése. [4]

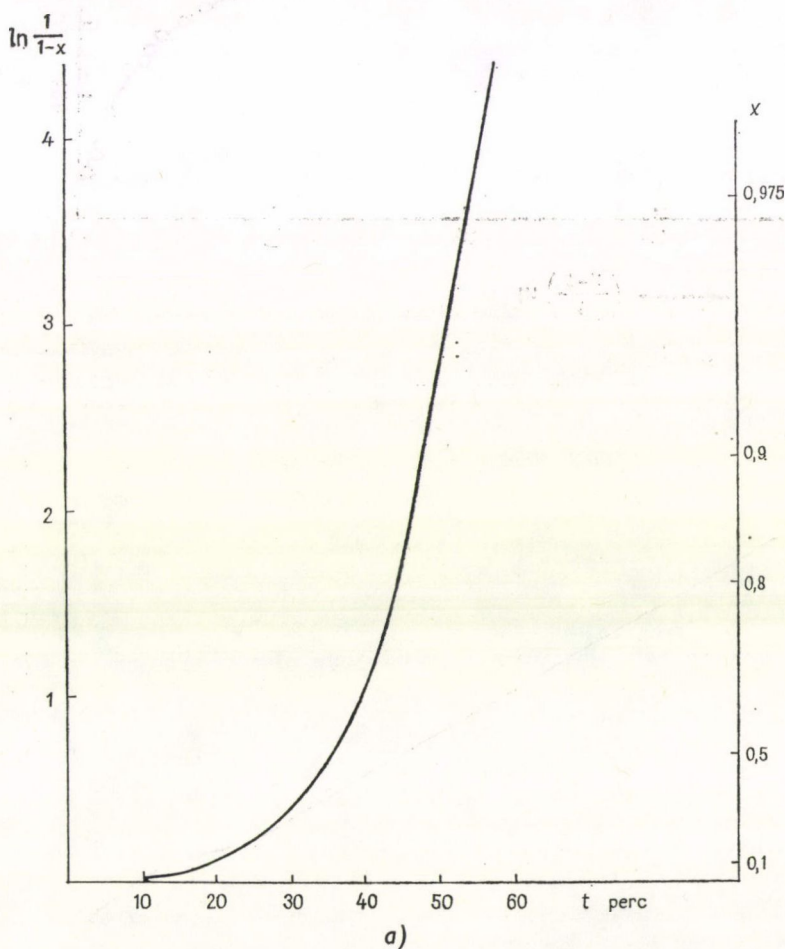
5b ábrában bemutatott típusú, különféle mérési módszerekkel, eltérő növekedési folyamatokra és különböző anyagokkal kapott görbéket fenti függvény szerint lehetett értelmezni. Ezt a 6. ábra szemlélteti. *Weijma* [6] mérte CsCl egykristályok fajlagos elektromos vezetőképességének hőmérséklet-függését a fázisátalakulási tartományban és dilatometriával ugyanezt a folyamatot. Mindkét esetben a 6e ábrában bemutatott eredményhez jutott (a dilatometriát oldatból igen lassan, egy év alatt nőtt kristályokkal mérte). Saját polikristályos préstesteken mért elektromos vezetőképességmérési kísérletek szerint a fázisátalakulás nem a 6. ábrában bemutatott két, hanem három szakaszból áll (7. ábra). A harmadik nem lineáris szakasz értelmezését (az új fázist kialakító hajtóerő Clausius Clapeyron típusú csökkenése) *Gaál* adta meg [5].



Mivel *Weijma* CsCl és saját TiCl egykristályokkal mért eredmények szerint az átalakulás csupán két (egy parabolikus és egy lineáris) szakaszból áll, a 7. ábrában bemutatott három szakasz kialakulása feltehetőleg a próbák konzisztenciájának (polikristályos préstestek) következménye.

Ugyancsak az Avrami típusú függvénnyel értelmezhető az ezüstjodid (AgI) (002) reflexióból mért intenzitásváltozás görbéje: 8. ábra [10].

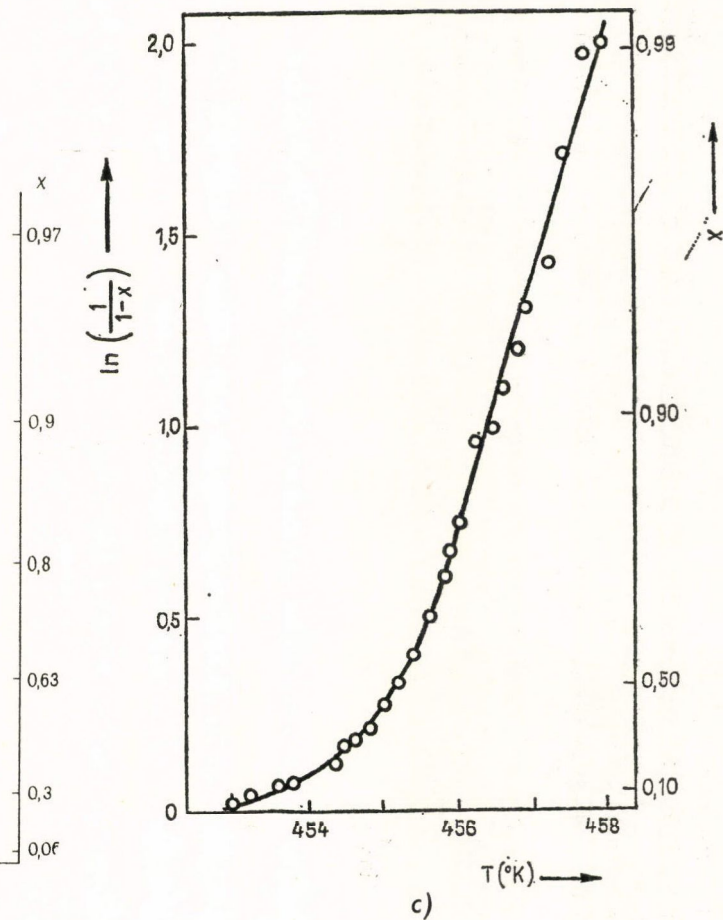
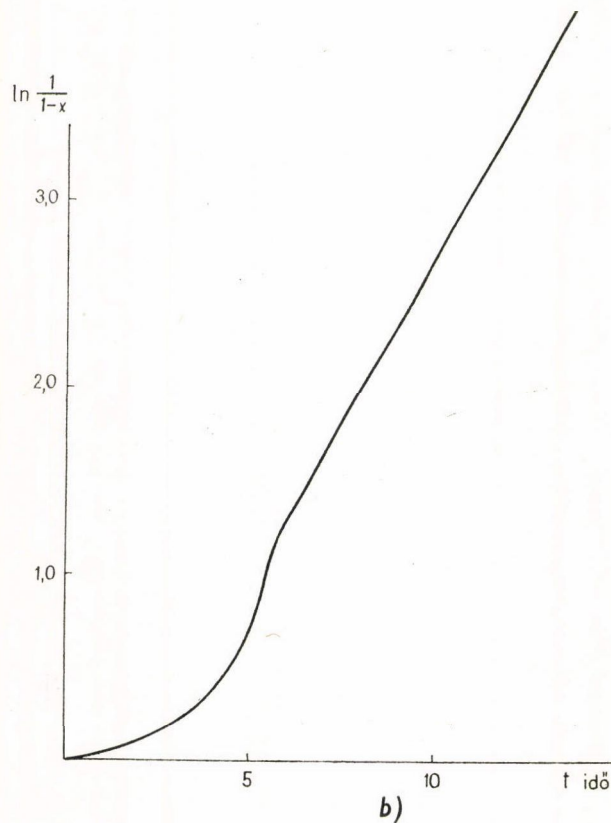
A bemutatott diagramok parabolikus szakaszából a magképződésre jellemző  $n \neq 1$  értéke meghatározható. A fázisátalakulási kísérletek szerint  $2 \leq n \leq 3$ , CdS-ből Cd precipitációjára  $n \approx 2$  és tantállaal végzett mérések szerint  $3 < n < 4$ . Míg  $n=2$  és  $n=3$  két és három dimenziós magokra utalnak, addig  $n=4$  érték szemcsehatárok elmozdulá-



6. ábra. A megnövekedett Ta szemcseméret, a kivált Cd fém és szerkezetet váltó polimorfok átalakult törtrészének ( $x$ ) időfüggése  $\ln \frac{1}{1-x}$  vers  $t$ , illetve  $T$  ábrázolásban ( $t$ =idő,  $T$ =hőmérséklet).

a) A Ta átlagos szemcseméretnövekedése [1].

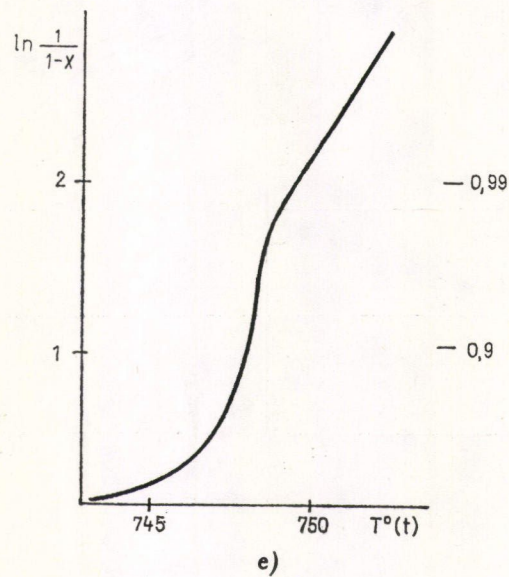
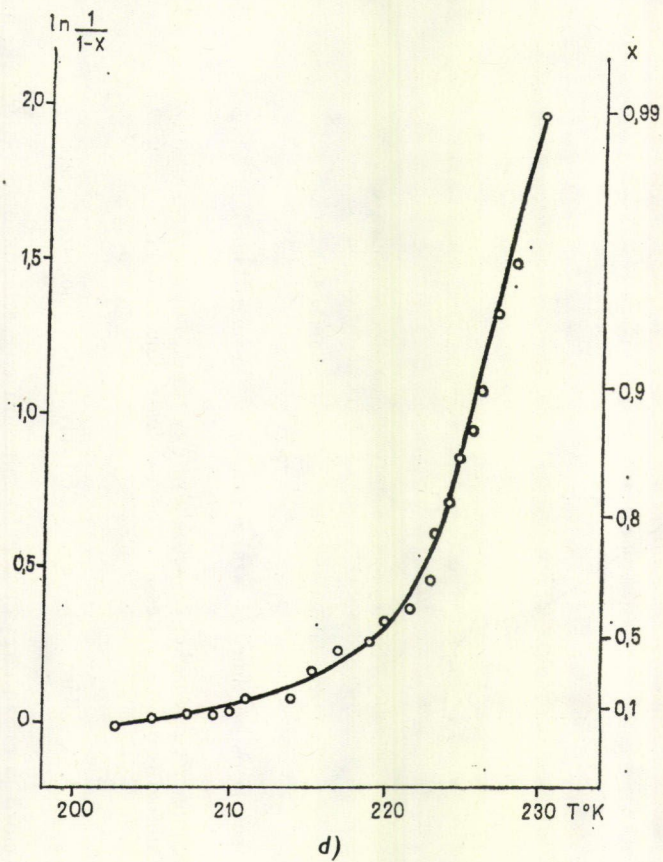




6. ábra

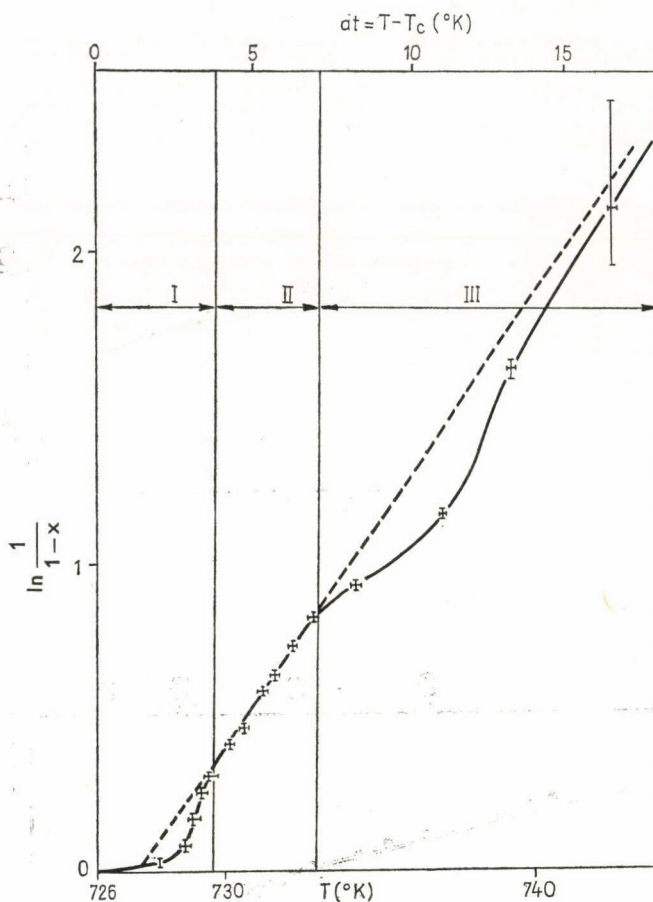
b) Cd kiválás [2]. c) TII fázisátalakulása (elektromos vezetőképességmérésből számolt értékek) [4].





6. ábra  
d)  $\text{NH}_4\text{I}$  fázisátalakulása (elektromos vezetőképességmérésből számolt értékek) [8]. e)  $\text{CsCl}$  fázisátalakulása (dilatometriából számolt adatok) [6].





7. ábra. Nagy nyomáson ( $10\,000\text{ kg}\cdot\text{cm}^{-2}$ ) előállított CsCl próbatetek elektromos vezetőképességméréssel mért fázisátalakulásának  $\ln \frac{1}{1-x}$  vers  $T, t$  ábrázolása [5]

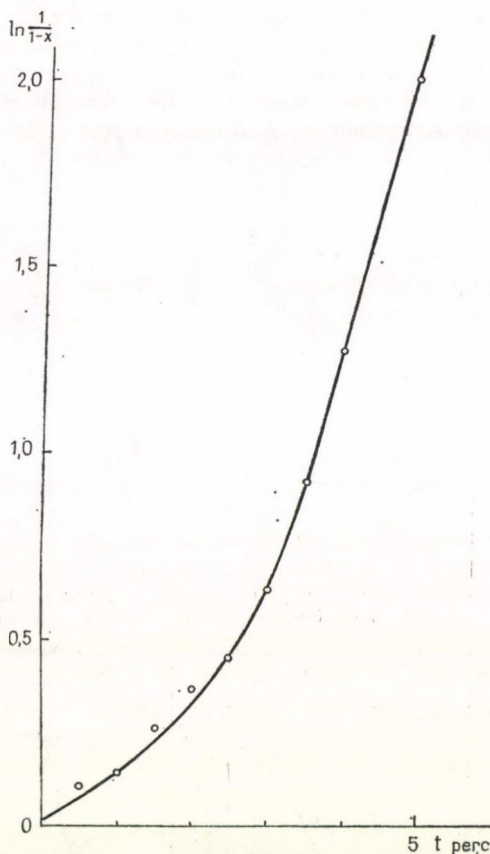
sával kapcsolatos. A lineáris szakaszban  $n=1$ , a már kialakult magok tovább nőnek [9].

Az eddigi eredményeket összefoglalva úgy tűnik, hogy a tárgyalt folyamatok kinetikája diffúziós magképződéssel és növekedéssel fejezhető ki.

### 3. A szilárd fázisú növekedési folyamatok finomszerkezete

Az előző pontban tárgyalt kép finomítására elvégezhetők olyan kísérletek, melyek szubmikroszkopikus, tehát részfolyamatoknak, következésképpen a szilárd fázisban lezajló növekedés finomszerkezetének feltárására alkalmasak. Így





8. ábra. AgI röntgendiffrakcióval mért hexagonális  $\rightarrow$  köbös fázisátalakulásának [10] intenzitás értékből számított  $\ln \frac{1}{1-x}$  vers  $t$ ,  $T$  ábrázolásban

1. emissziós elektronmikroszkópiával vizsgálható a polikristályos anyag *egyetlen* szemcséjének sorsa (egyes szemcsék méretbeli változása) az átlagos szemcsenövekedés keretén belül;

2. NaCl modellanyagon mért mikrokeménységértékek precipitációs folyamatok részleteit tárják fel;

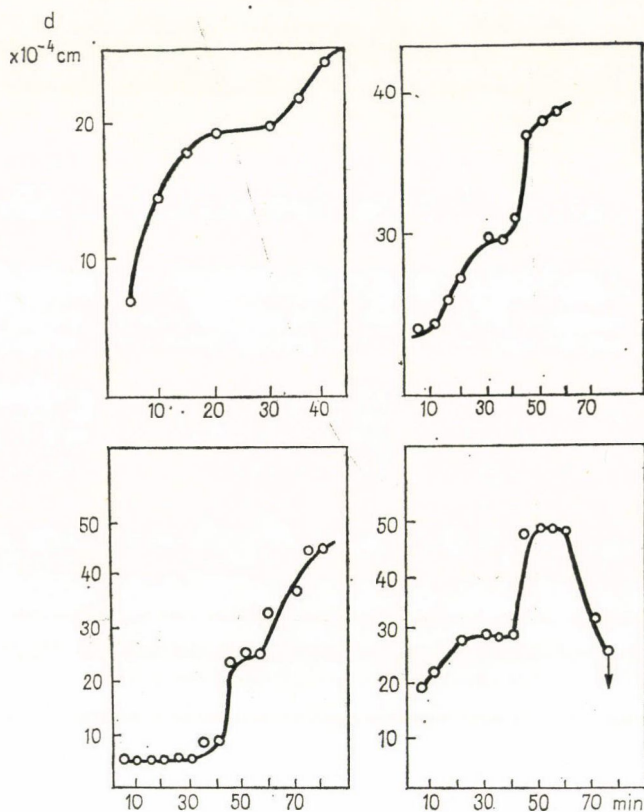
3. az elektromos vezetőképesség időfüggő változása a kritikus hőmérsékleti tartomány közelében az időnek nem monoton függvénye, finom szerkezetet mutat, — ugyanígy

4. a fázisátalakulásra jellemző fajlagos elektromos vezetőképességváltozás hőkezeléssel jelentősen befolyásolható, végül

5. kiválasztott tartományú elektrondiffrakcióval egyes szubmikroszkopikus (mághéretű) krisztallitok polimorf fázisátalakulása nyomon követhető.



Egyes Ta szemcsék méretváltozására vonatkozó görbéket a 9. ábra szemlélteti. A folyamat nem folytonos, ugrásszerű, egyes lassúbb növekedési periódusokat igen gyors szakaszok követik, más esetben a növekedés hosszabb időre megáll, ismét más-kor nem növekedés, hanem méretcsökkenés lép fel, a kristály el is tűnhet, környezete viszont éppen ennek a szemcsének rovasára nőtt. Egyes elektronemisszióval végzett kísérletek szerint továbbá egyes szemcsék mélyen a Ta olvadáspontja alatt,  $1000^\circ\text{C}$ -on

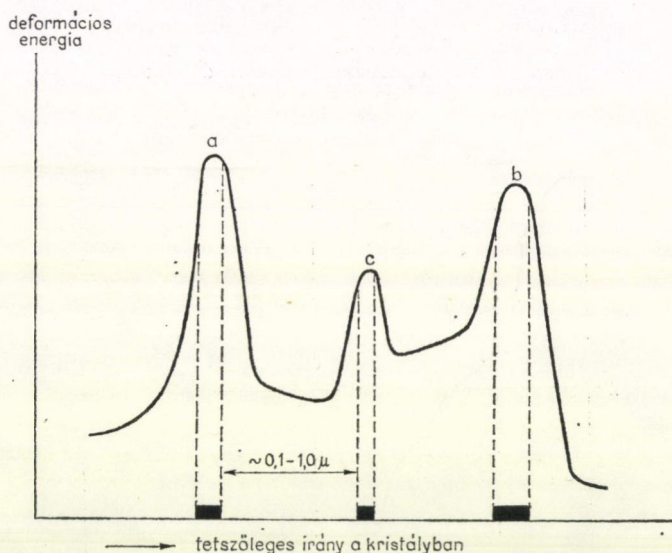


9. ábra Egyedi Ta szemcsék méretváltozásának időfüggése [1]

hirtelen folyadékszerű állapotba kerülnek, majd ugrásszerűen az eredetitől teljesen eltérő kontrasztú és méretű új szemcsék alakulnak ki, melyek azután környezetük rovasára gyors növekedésnek indulnak. A kontrasztkülönbség oka az elektron kilépési munka orientációfüggése, mely tércentrált köbös fémeknél *Smoluchowski* szerint a következő sorrendben csökken:  $\{110\}$ ,  $\{211\}$ ,  $\{100\}$ ,  $\{111\}$  [11]. Leírt folyamat tehát  $\{h_1k_1l_1\} \rightarrow \{h_2k_2l_2\}$  orientációváltozás következménye. Mivel az egyes felsorolt síkok közti orientáció eltérés nagy, érthető, hogy az erőteljes kontrasztváltozás folyadékszerű (liquid like) átmenet következménye. A bemutatott felvételeken (1. ábra) is látható kontrasztkülönbségekből jelentékeny orientáció eltérésekre, ezekből viszont



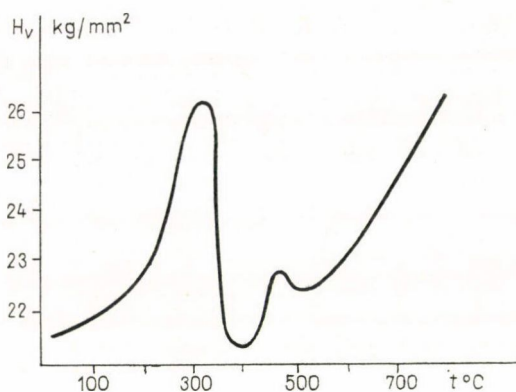
olyan belső feszültségekre kell következtetni, melyek kiegyenlítésére a kristallit mintegy megolvad [1]. A kialakult szemcse nyilván eléggé stabil, azaz feszültségmentes ahhoz, hogy magként szerepeljen a környezeté rovására (minimális energiaállapotban lévén) növekedésnek induljon. Ezek a kísérleti tapasztalatok újból időszerűvé tesznek egy régebbi rekristallizációs magképződési elméletet, mely szerint a rács legerősebben deformált részei összeomlanak, ezután deformálatlan, vagy majdnem deformálatlan kis energiájú magokká állnak össze, melyek szomszédos deformáltabb (nagyobb energiátartalmú) tartományok rovására növekedésnek indulnak [12]. Ezt a folyamatot vázlatosan a 10. ábra szemlélteti. A jelenség azonban nem általános. Saját kísérleteinkben is csak esetenként lehetett megfigyelni (kb. 25 % valószínűséggel). Továbbá például *Tardy* ugyancsak elektronemissziós módszerrel az ólom rekristallizációját vizsgálta, de hasonló jelenséget nem tapasztalt [13].



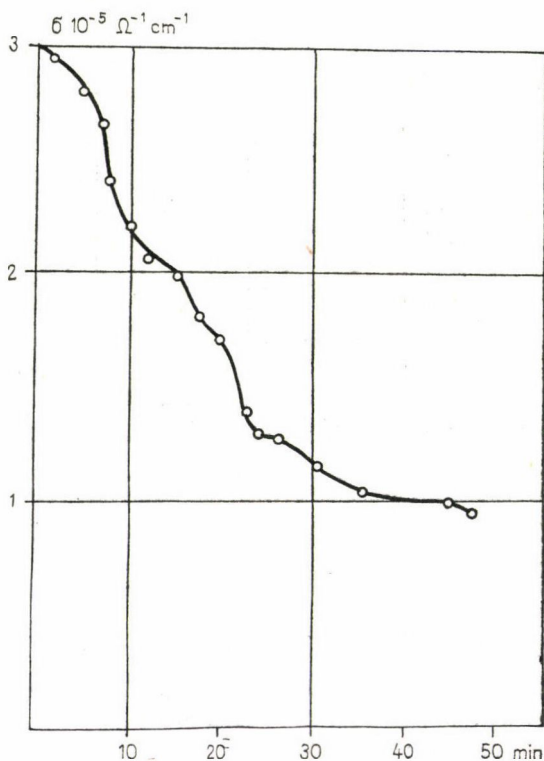
10. ábra. A folyadékszerű állapot kialakulásának diagramja. Az ordináta a polikristályos minta belső energiáját szemlélteti. Magas belső energia (feszültségek) a nagy energiájú tartományok összeomlásához és új kisenergiájú magok kialakulásához vezethet (kihúzott fekete vonalak az abszcisszán). A kialakult kis energiájú magok a szomszédos nagyobb energiájú tartományok rovására növekedhetnek [12]

Precipitációs folyamatok finomabb részletei mikrokeménységméréssel egyes, erre alkalmas anyagokon jól tanulmányozhatók [14], [15]. Fokozatosan mind magasabb hőmérsékleten hőkezelt, majd az ezen a hőmérsékleten bekövetkezett állapotot hirtelen lehűtéssel való befagyasztás után mért NaCl egykristályok mikrokeménysége a hőkezelési hőmérsékletnek nem monoton függvénye, hanem maximumokon megy keresztül, 11. ábra. Ezeket a kísérleti eredményeket úgy lehetett értelmezni, hogy az ábrán látható első csúcs két-vegyértékű szennyezőkből (Ca, Ba, Sr) kialakult GP-zónákat jelzi, a következő minimum pedig a két vegyértékű szennyezők precipitáció-





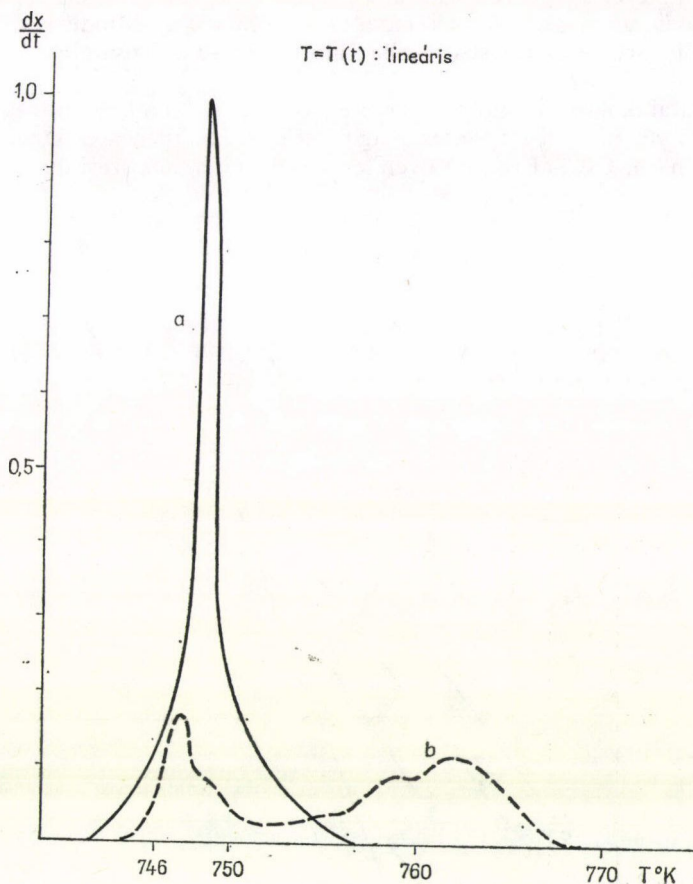
11. ábra. NaCl egykristály mikrokeménységének alakulása a hőkezelés és gyors lehűtés hatására. Abszcissa: hőkezelési hőmérséklet, ordináta: Vickers keménység [14], [15]



12. ábra. CsCl fajlagos elektromos vezetőségének izotermikus változása az idő függvényében (hőmérséklet:  $470^{\circ}\text{C}$ ). Kifejezésre jut az izotermikus átalakulás finomszerkezete [18]



jával kapcsolatos kilágyulás következménye. A második maximum és minimum ugyanígy egy-vegyértékű szennyezőktől származik. Ezeket a következtetéseket Sárközi kiterjedt vizsgálatai megerősítették [16] [17]. A kísérleti eredmények a precipitáció diffúziós magképződési értelmezését a mikrostruktúra oldaláról megerősítik.



13. ábra. CsCl fázisátalakulásának hőmérséklet-függése:  
a) hőkezelés előtt,  
b) 4 órás 470 °C-on történt hőkezelés után [7]. Az ordináta 1-re normált

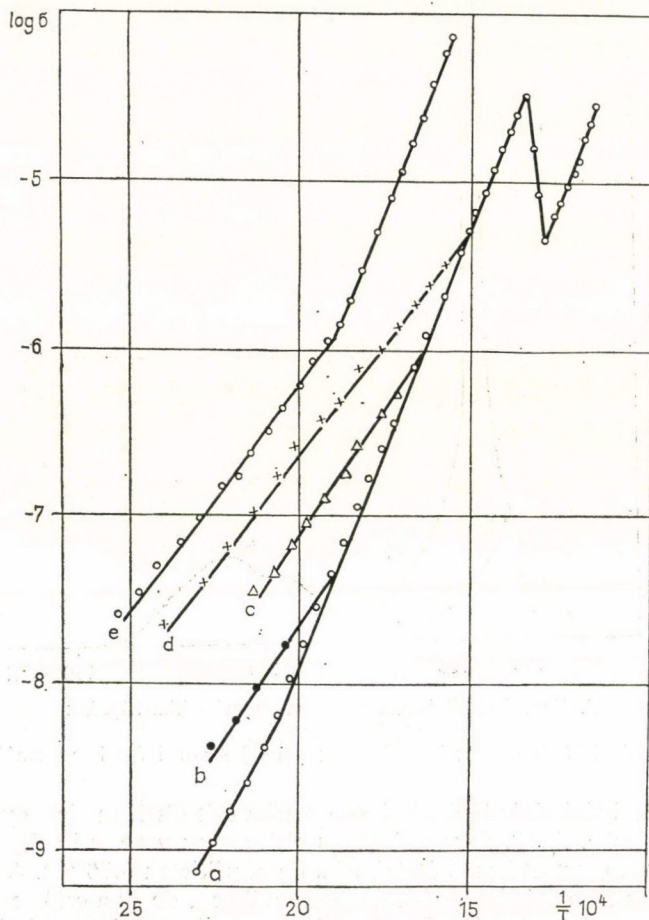
Polimorfok fázisátalakulásának finom szerkezetét CsCl modellanyagon a 12. és 13. ábra mutatja be. A 12. ábra a fajlagos elektromos vezetés időfüggő változását szemlélteti stabilan tartott kezdő átalakulási hőmérsékleten (470 °C). A vezetőképesség az átalakulás előrehaladtával fokozatosan csökken, de ez a csökkenés az időnek nem monoton függvénye, lassúbb és sebesebb szakaszok váltják egymást<sup>1</sup>. A 13. diag-

<sup>1</sup> (Míg TII esetében a fázisátalakulást a vezetőképesség gyors emelkedése indikálja, addig a CsCl  $\alpha \rightarrow \beta$  átmenetben a vezetőképesség csökken [7]).



ram CsCl fázisátalakulásának hőmérséklet-függését szemlélteti hőkezelés előtt (a), majd több órás, az átalakulási hőmérsékleten történt hőkezelés után (b). A jobb szemléltetés kedvéért az effektív fajlagos elektromos vezetést átalakult  $x$ -tört részre számoltuk át, majd az így kapott a 2. ábrán bemutatott típusú görbe első deriváltját ábrázoltuk. A hőkezelés a görbe lefutását lényegesen megváltoztatta, ez lehet egy- vagy két vegyértékű szennyezők diffúziójának következménye. Mindenesetre megfelelő koncentrációjú  $\text{SrCl}_2$ -nek a CsCl rácsba való beépítése a fázisátalakulást elnyomja: 14. ábra [7].

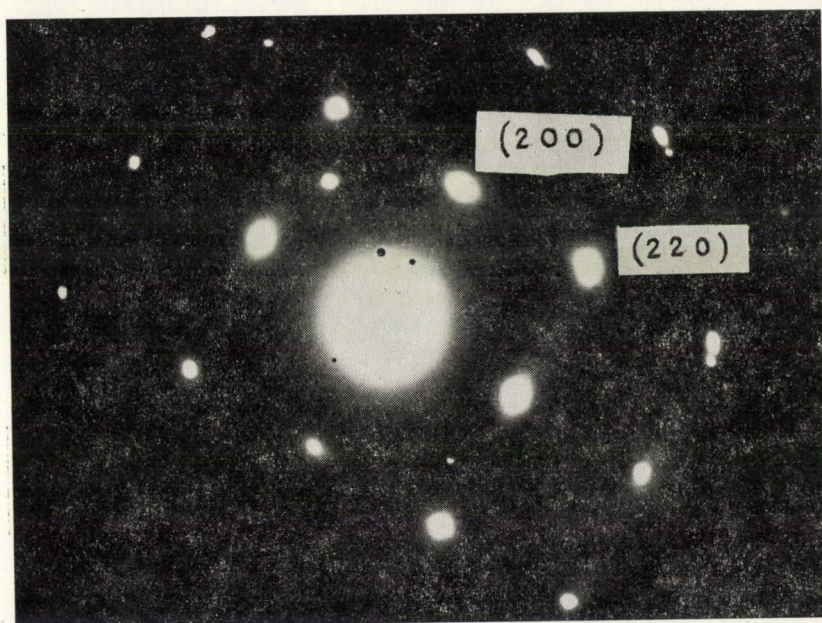
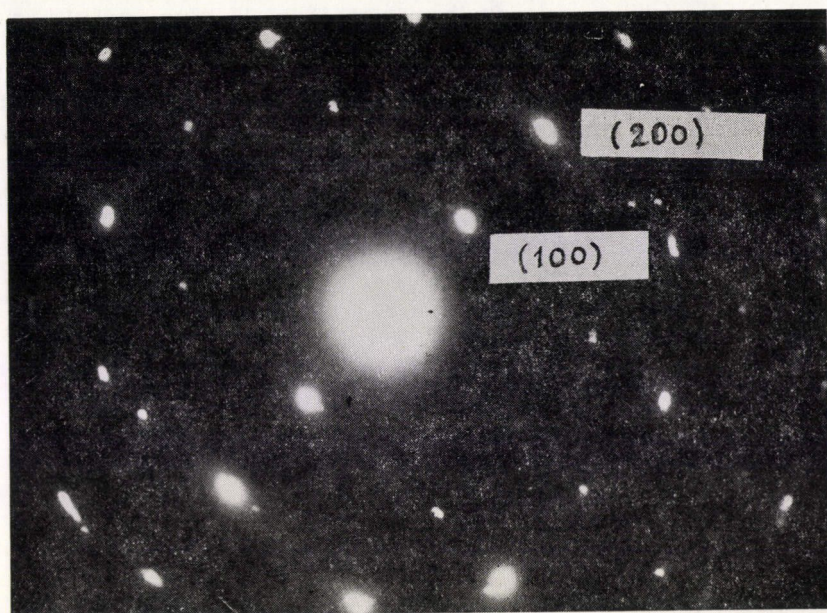
A fázisátalakulásnak finomszerkezete kiválasztott területű diffrakcióval, azaz polikristályos vékony réteg egyetlen magméretű kristallitjének elektrondiffrakciójával is vizsgálható. CsCl-al végzett ilyen természetű kísérletek szerint magméretű egy-



14. ábra.  $\text{SrCl}_2$  hatása a CsCl elektromos vezetőképességméréssel indikált fázisátalakulására [7]:

- a) spektráltiszta kiindulási anyag, b)  $12.64 \times 10^{-4}$  mol Sr/Cs  
c) 25.28 mol Sr/Cs, d) 37.92 mol Sr/Cs, e) 98.84 mol Sr/Cs

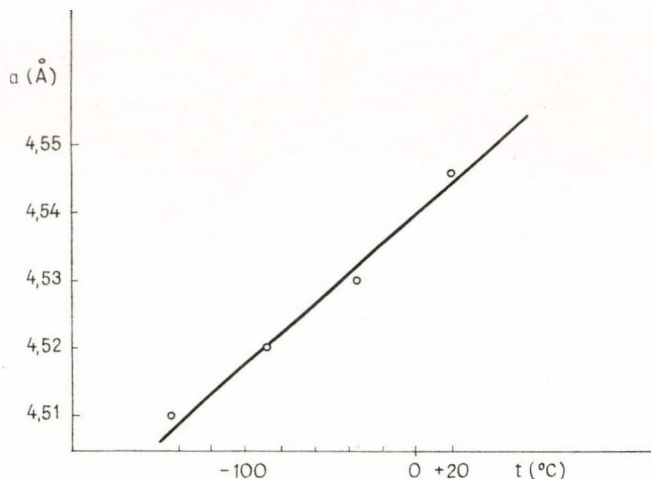




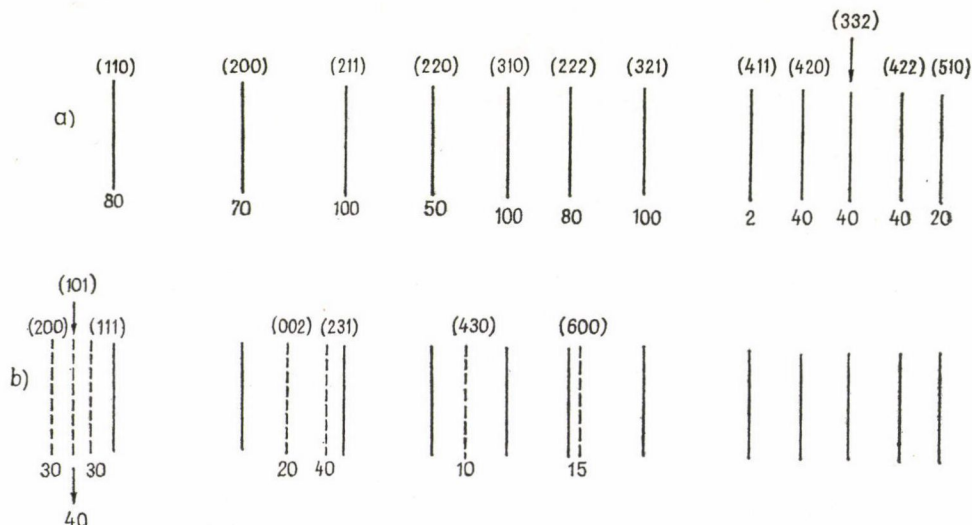
15. ábra. Egyetlen CsCl mikroszemcse fázisátalakulásának kiválasztott területű elektrondiffrakciója  
a)  $Pm3m$   $\alpha$ -fázis, b)  $Fm3m$   $\beta$ -fázis [18]



kristályok hirtelen átbillenéssel alakulhatnak át [18]. A 15. ábra egy CsCl kristallit két fázisának kiválasztott területű elektrondiffraktogramját mutatja be. A magas hőmérsékleten stabil  $Fm\bar{3}m$  ( $\beta$ -NaCl típusú) struktúra  $470^\circ\text{C}$ -on hirtelen átbillenéssel, tehát nem diffúzióval, alakult ki a  $Pm\bar{3}m$  struktúrából ( $\alpha$ -fázisból). Az 1. fejezetben tárgyalt diffúziós kinetikát tehát polimorfok fázisátalakítására úgy kell módosí-



16. ábra. Polikristályos vékonyréteg CsI  $Pm\bar{3}m$  fázisú rácsállandójának hőmérsékletfüggése csökkenő hőmérsékleten [19]



17. ábra. A CsI  $Pm\bar{3}m$  és mélyhőmérsékletű tetragonális fázisának precíziós elektrondiffrakcióval mért reflexiói [19]. A kihúzott vonalak a  $Pm\bar{3}m$ , a szaggatott vonalak a mélyhőmérsékletű tetragonális fázisra vonatkoznak. A vonalak fölé írt számok a  $(hkl)$  indexeket, a vonalak alá írt számok pedig az egyes reflexiók relatív intenzitását jelölik



tani, hogy magok nemcsak diffúzióval, hanem atomi rendszerek kooperatív átbillenésével is keletkezhetnek. Ez az értelmezés magyarázhatja a 13. ábra szakaszos lefutását is.

A  $Pm3m$  tércsoporthoz tartozó CsI-nak  $-140^\circ\text{C}$  körül kialakul egy tetragonális fázisa, melyet jelentékeny rácskontrakció előz meg (16. ábra) [19]. Az átalakulási igénybevétel a számítások szerint kb. 25%, ez magyarázhatja egy, a térfogati kontrakciónak megfelelő, új tetragonális szerkezet kialakulását. A régi és új fázis reflexióit vázlatosan a 17. ábra szemlélteti. Az átalakulási hőmérséklet miatt ( $-140^\circ\text{C}$ ) az új fázis magjai feltehetőleg szintén kooperatív átbillenéssel jönnek létre és nem diffúzióval. A mélyhőmérsékleti kísérleti technika nehézségei miatt kiválasztott területű elektrondiffrakciót nem sikerült készíteni.

#### 4. Nem egyensúlyi fázisok előfordulása

Polimorfok esetében minden stabil fázis tartalmazza a nem egyensúlyi fázis elemeit. CsCl-ra és TlI-ra ezt a 18. és 19. ábra mutatja be.

CsCl  $Pm3m$   $470^\circ\text{C}$  alatti egyensúlyi fázisának koordináta-rendszere például ortogonális, a nem egyensúlyi fázis pedig egy, az ortogonális koordináta-rendszerben kijelölhető  $\bar{x}_1^0, \bar{x}_2^0, \bar{x}_3^0$  rendszer. A fázisátalakulás krisztallográfiai elemzése szerint az átalakulás során a nem egyensúlyi fázis dilatációval és rotációval alakítja az új fázis ortogonális koordináta-rendszerét. Ennek során az új fázis kristálytani síkjai kerülnek az eredeti egyensúlyi helyzet kristálytani síkjai helyébe. CsCl esetében a  $Pm3m$  és a  $470^\circ\text{C}$  feletti stabil NaCl típusú  $Fm3m$  szerkezet alacsony indexű síkjai az alábbiak szerint változnak:

$$\{110\}_{Pm3m} \Rightarrow \{001\}_{Fm3m}$$

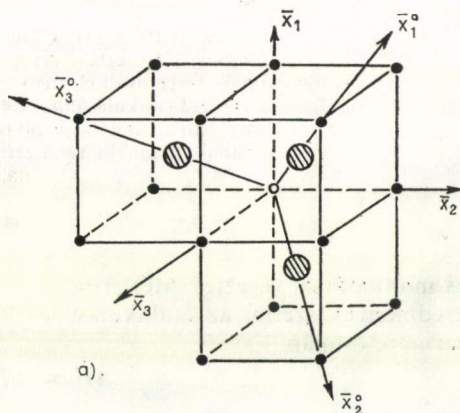
$$\{111\}_{Pm3m} \Rightarrow \{001\}_{Fm3m}$$

Az átalakulási folyamat kb. 24%-os igénybevétellel jár [20]. Tapasztalat szerint CsCl és általában CsCl típusú polimorfok a fázisátmenetet nem bírják, egykristályok polikristályokká töredeznék szét, hacsak nem alkalmazunk gondos, nagyon lassú hőmérsékleti programot. TlI esetében viszont, hasonló megfontolások alapján, az igénybevétel csupán 2%. Ezek az adatok jól értelmezik a CsCl és TlI fázisátalakuláshoz szükséges szabad enthalpia különbségeket. Az átalakulási hő meghatározására megbízható eredményeket szolgáltat a differenciál termoanalízis (DTA). Ezzel a módszerrel Weijma CsCl-ra

$$\Delta H = 750 \pm 80 \text{ cal/mol}$$

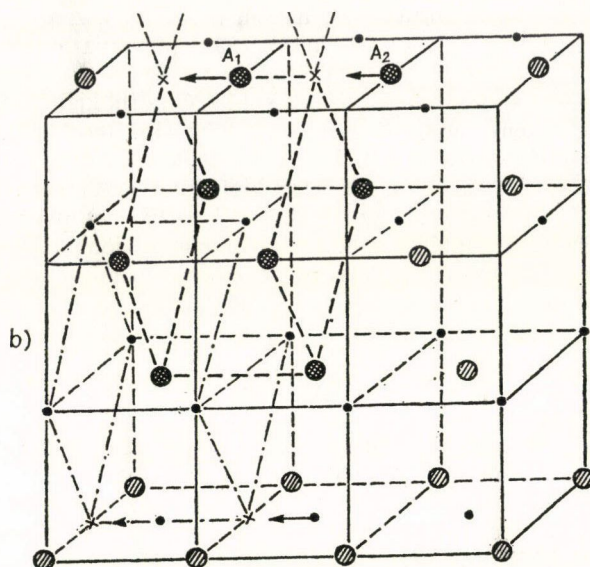
értéket kapott [6].

Az MTA Kristályfizikai Kutató Laboratóriumában Voszka Rudolf zónázott TlI egykristályain, a groningeri egyetem Műszaki Anyagok Fizikája Intézetében Arends



18. ábra. A  $Pm3m$   $\beta$ -szerkezetű CsCl elemei az  $Fm3m$   $\alpha$ -rácsban [20]





19. ábra. A Pm3m (CsCl típusú) elemek az egyensúlyi Pmcm (rombos) TII-rácsban. A rombos cellában levő még nem ortogonális tércentrált elemet szaggatott vonalak jelzik. A Pm3m szerkezet kialakulásához az  $A_1$  és  $A_2$ -vel jelzett ionoknak a nyíl irányában a \*-gal megjelölt helyre kell jutniuk és a szaggatott vonallal megjelölt rendszernek ortogonális rendszerre kell átalakulnia

és munkatársai végeztek Metler-berendezéssel DTA-méréseket. Az itt először közölt eredmények szerint az átalakulási hő Pmcm  $\rightarrow$  Pm3m (ortorombos CsCl-típus) átmenetre csupán

$$\Delta H = 167 \pm 10 \text{ cal/mol}$$

illetve Pm3m  $\rightarrow$  Pmcm átmenetre

$$\Delta H = 174 \pm 10 \text{ cal/mol.}$$

(20. ábra).

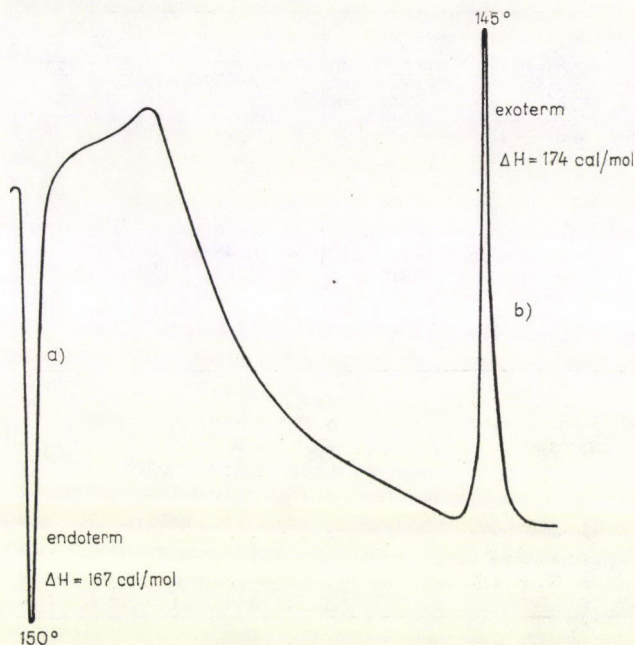
Az elmondottak alapján felmerült az a gondolat, hogy az egyensúlyi fázis kis térfogatelemekben tartalmazhatja a nem egyensúlyi fázis magjait. Ilyen jelenséget már CsCl esetében is lehetett tapasztalni [3]. Tájékoztató jellegű röntgendifrakciós mérések szerint, továbbá például TII hét  $+170^\circ\text{C}$  alatt egyensúlyi ortorombos reflexiója mellett (rácsparaméterek:  $a=5,252 \text{ \AA}$ ,  $b=4,601 \text{ \AA}$  és  $c=12,92 \text{ \AA}$ )  $20^\circ\text{C}$ -on két CsCl típusú (Pm3m), csak  $170^\circ\text{C}$  felett stabil, reflexiót ((111) és (200)) tartalmaz  $a=4,217 \text{ \AA}$  rácsparaméterrel.

Hasonló eredménnyel jártak egyes ferroelektromos kristályokkal végzett kiválasztott területű elektrondifrakciós kísérletek [21]. KDP és  $\text{KNO}_3$  minták ily irányú



a) hevítés : b) hűtés  
 etalon : In  
 tégely :  $\text{Al}_2\text{O}_3$   
 reference anyag :  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (500mg)

atmoszféra :  $\text{N}_2$   
 fűtés :  $8^\circ\text{C}/\text{min}$   
 $t_{\text{max}} = +350^\circ\text{C}$



20. ábra. Zónázott TII egykristály fázisátalakulásának DTA-görbéje.  
 a) emelkedő hőmérséklet b) csökkenő hőmérséklet

adatait az I., illetve a II. táblázat foglalja össze. Ez a jelenség polimorf kristályok növesztése szempontjából fontos, mivel a nem egyensúlyi magok az alpmátrix kristályhibáinak tekinthetők, melyek eltérő rácsparaméter értékeikkel környezetük-höz rosszul illeszkednek s jelentékeny belső feszüléseket hozhatnak létre.

## 5. Összefoglalás

1. Ismertettünk olyan szilárd-fázisú kristályosodási folyamatokat feltáró kísérleteket, melyek eredményei a diffúziós magképződés és növekedés kinetikájával értelmezhetők.

2. A mérési módszerek jellegüknél fogva nagyszámú részfolyamat átlagolt eredményeit szolgáltatták.

3. Tárgyaltunk olyan kísérleteket, melyek lehetővé tették a növekedési folyamatok finomszerkezetének vizsgálatát. Eredményeink szerint a hőkezelés indukálta kristálynövekedés és polimorfok fázisátalakulása esetében megfigyelt egyes részfolyamatok nem mindig értelmezhetők egyszerű diffúziós kinetikával.



## I. TÁBLÁZAT

KDP mikrokristály kiválasztott területű elektrondiffrakcióval meghatározott reflexiói

<i>d</i>	<i>hkl</i>	Szerkezet	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>
3,374*	002	Fdd2			6,748
2,730	220	I42d	7,722	7,722	—
2,336	310	I42d	7,387	7,387	—
1,944*	422	Fdd2	10,82	9,99	6,75
1,831*	440	Fdd2	11,18	9,69	—
1,760	004	I42d	—	—	7,04
1,650	420	I42d	7,379	7,379	—
1,581	204	I42d	7,496		6,97
1,572	332	I42d	7,496		6,887
1,509	233	I42d	7,148		6,980
1,443*	404	Fdd2	11,184	—	6,738
1,398*	800	Fdd2	11,184	—	—
1,288	215	I42d	7,496		6,975
1,205	424	I42d	7,496		6,934

I42d  $\bar{a}=7,446 \text{ \AA}$   
 $\bar{c}=6,965 \text{ \AA}$   
 20 °C-on egyensúlyi fázis

\*Fdd2  $\bar{a}=11,093 \text{ \AA}$   
 $\bar{b}=9,845 \text{ \AA}$   
 $\bar{c}=6,744 \text{ \AA}$   
 Curie pont: -150 °C

20 °C-on nem egyensúlyi  
 fázis

## II. TÁBLÁZAT

KNO<sub>3</sub> mikrokristályok kiválasztott területű elektrondiffrakcióval meghatározott reflexiói

<i>d</i>	<i>hkl</i>	szerkezet	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>
3,290	002	Pmcn			6,580
3,075	121	Pmcn	5,546	9,168	6,240
2,773	200	Pmcn	5,546		
2,668*	110	R3m	4,400		
2,623	022	Pmcm		9,668	6,240
2,292	040	Pmcm		9,168	
2,049	132	Pmcm	5,414	9,420	6,240
2,007*	111	R3m	4,350		
1,336*	300	R3m	4,300		
0,8466*	223	R3m	4,33		

Pmcm,  $\bar{a}=5,502$   
 $\bar{b}=9,356$   
 $\bar{c}=6,325$   
 20 °C-on egyensúlyi fázis

\*R3m  $\bar{a}=4,345 \text{ \AA}$   $\alpha=76,93^\circ$   
 Curie point: 120 °C (reference 3)  
 20 °C-on nem egyensúlyi fázis

4. Két és egy vegyértékű kationokkal szennyezett NaCl-rendszerekben lezajló kiválási folyamatok finomszerkezete viszont e folyamatoknak csak diffúziós jellegét támasztja alá.

5. Polimorfok esetében a nem egyensúlyi fázis egyes térfogatelemei (mint kristályhibák) az egyensúlyi fázisban előfordulhatnak. Ennek a felismerésnek polimorf kristályok növesztése szempontjából van jelentősége.



## IRODALOM

1. *Morlin Z., Tremmel J.*, J. de Microscopie, 5, 431, 1966.
2. *Morlin Z.*, Phys. Stat. Sol. 2, 205, 1962.
3. *Morlin Z., Tremmel J.* Nature, 205, 1311, 1965. Acta Phys. Ac. Sc. Hung. 21, 129, 1966.
4. *Morlin Z.*, Phys. Stat. Sol. (a) 565, 1971.
5. *Gaál I., Morlin Z., Tarján I.*, Acta Phys. Ac. Sc. Hung. 27, 25, 1969.
6. *Weijma H.*, Some Aspects of the Phase Transformation in Solid CsCl. VRB Offsetdrukkerij. Groningen, 1971. pp VI, 85.
7. *Weijma H., Westra K. E.*, Phys. Stat. Sol. (a) 11, 729, 1972.
8. *Morlin Z.*, Acta Phys. Ac. Sc. Hung. 21, 137, 1966.
9. *Morlin Z.*, Acta Phys. Ac. Sc. Hung. 33, 377, 1973.
10. *Christian J. W.*, The Theory of Transformation in Metals and Alloys. Pergamon Press, Oxford, 1965. pp. XVI, 973.
11. *Schneider C. J., Whiting R. W. jr.*, Amer. Min. 48, 737, 1963.
12. *Smoluchowski R.*, Phys. Rev. 60, 661, 1941.
13. *Burgers W. G.*, Rekristallisation, Verformter Zustand und Erholung. Akad. Verl. Leipzig, 1941.
14. *Beck P. A.*, Annealing of Cold Worked Metals. Advances in Physics 3, 245, 1954.
15. *Tardy P.*, Prakt. Met. 5, 485, 1968.
16. *Morlin Z.*, Magyar Fizikai Folyóirat, 10, 223, 1962.
17. *Morlin Z.*, Phys. Stat. Sol. 8, K77, 1965.
18. *Sárközi J., Böszörményi—Nagy E.* Periodica Polytechn. 16, 91, 1972.
19. *Sárközi J.*, Krisztallografia, 22, 784, 1977.
20. *Morlin Z.*, Acta Phys. Ac. Sc. Hung. 24, 277, 1968.
21. *Morlin Z.*, Acta Cryst. B27, 2493, 1971.
22. *Morlin Z.*, Acta Phys. Ac. Sc. Hung. 24, 75, 1968.
23. *Morlin Z., Jeszenszky B., Hartmann E., Malicskó L., Péter Á.* Kristall u. Technik, 13, 450, 1978.





# OXIDKRISTÁLYOK NÖVESZTÉSE ÉS RÖNTGENTOPOGRÁFIA

PAITZ JÓZSEF és ZSOLDOS LEHELNÉ

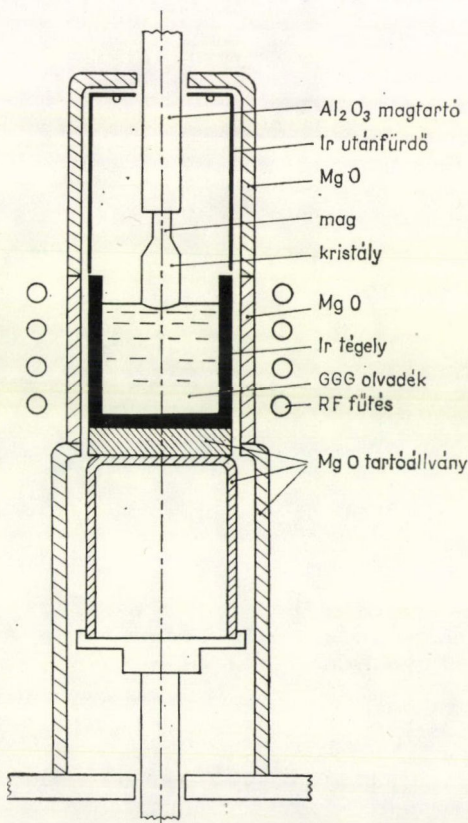
MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

Az idő megmutatta, hogy az ásványok világa nemcsak értékes anyagokat tartalmaz az emberiség számára, hanem gyakran ötletekkel szolgál olyan anyagok előállításához, amelyek a természetben elő sem fordulnak. Ez az út persze igen szövevényes, mint pl. a gránátok esetében is, ahol jelentős idő kellett ahhoz, hogy a természet adta példa ötletté érjen új összetételek előállításához. A Menzer által 1926-ban publikált gránátstruktúra, ill. a természetben előforduló két változata a grossularit ( $\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$ ) és a pyrop  $[\text{Mg}_3\text{Al}_2(\text{SiO}_4)_3]$  hosszú időn keresztül csak a mineralógusok számára volt fontos, a fizikusok alig 15 éve ismerték fel jelentőségét.

A természetben előforduló gránátok gyakorlati fontossága a lágy csiszolóporokra korlátozódott. Ennek jó példája volt a szerszámüzletben árusított gránát-papír, amit fa csiszolására használtak. Azonban ennél jobb csiszolóanyagok is léteztek, ezért ez a felhasználása is korlátozott volt. Néhány szilikát gránát félábragő és az ékszerek rajongóit örvendeztette.

A mágneses gránátok felfedezése jelentős alkalmazást nyert a modern számítási- és híradástechnikában. A szennyezett gránátok tág körének van lézertechnikai alkalmazása. Ilyen módon a szintetikus gránátok világa a tudományos és technikai felfedezések gazdag területévé vált.

Minthogy az oxidok világa felmérhetetlenül nagy, de még a gránátok csoportjára leszűkített területének áttekintése is — a mesterségesen előállított gránátok sokasága miatt — ma már nehézségekbe ütköznék. Megkíséröljük az oxidegykristályok növesztését egy olyan kiragadott példán keresztül bemutatni, amely jelentős mértékben járult hozzá a növesztési technika fejlődéséhez.

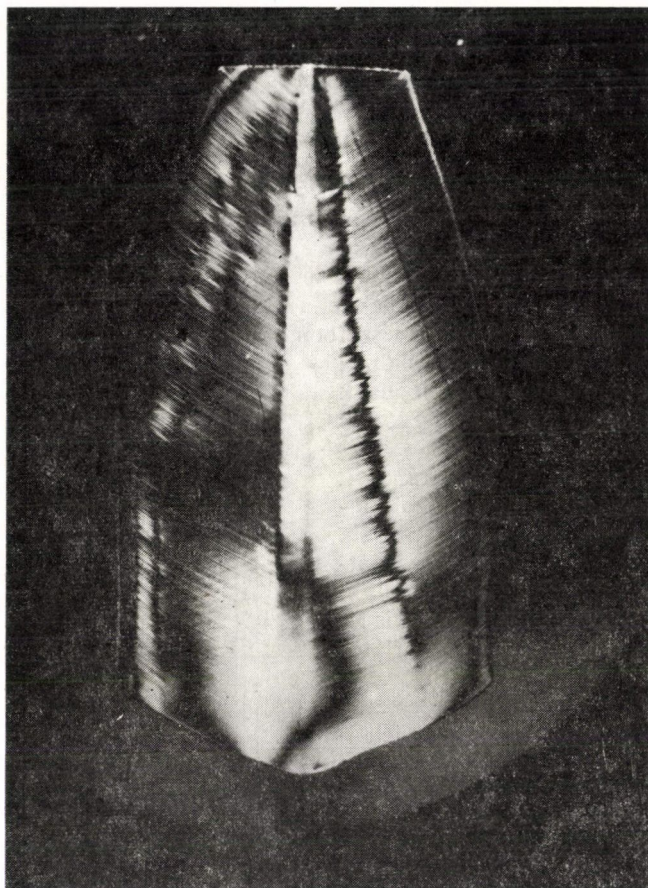


1. ábra



A mágneses buboréktárolók kutatása rendkívül magas követelményeket támaszt az alapkristályokkal szemben. Ilyen jó minőségű hordozók gadolinium-gallium-gránát (GGG) egykristályokból készülnek.

A GGG kristályok Czochralski módszerrel olvadékból növeszthetők. Olvadáspontja  $1750^{\circ}\text{C}$ . A növesztőrendszer belső felépítése, melyben a növesztést és a víz-



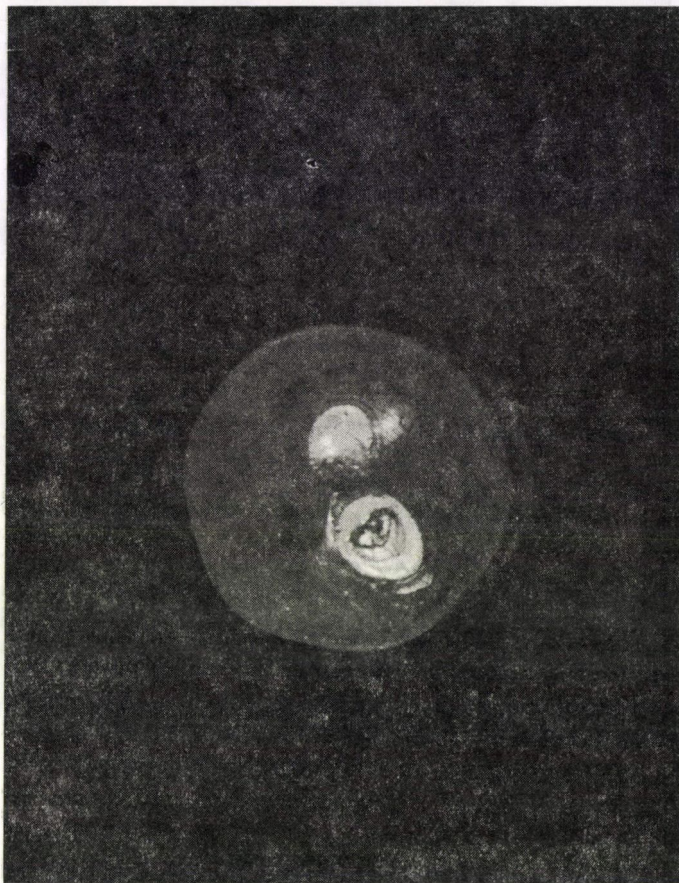
2. ábra

gálatokat végeztük az 1. ábrán látható. A magas hőmérséklet és a bomlást megakadályozó oxidáló atmoszféra miatt a növesztés irídiumtégelyből történik, melyet indukciósan fűtünk. A hőszigetelésre alkalmazott kerámiák  $\text{MgO}$ -ból és  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -ból készültek. Az olvadékfelszín sugárzási veszteségének csökkentésére a tégelyt irídium utánfűtővel és  $\text{Al}_2\text{O}_3$  hőszigetelővel fedtük le.

Számos oxid, így a gránátok sajátos tulajdonsága, hogy saját olvadékának hőmérsékleti sugárzása számára átlátszók, ezért sok hőt vezetnek el az olvadékból. Ennek az a következménye, hogy a kristálynövekedési front az olvadékfelszín alá



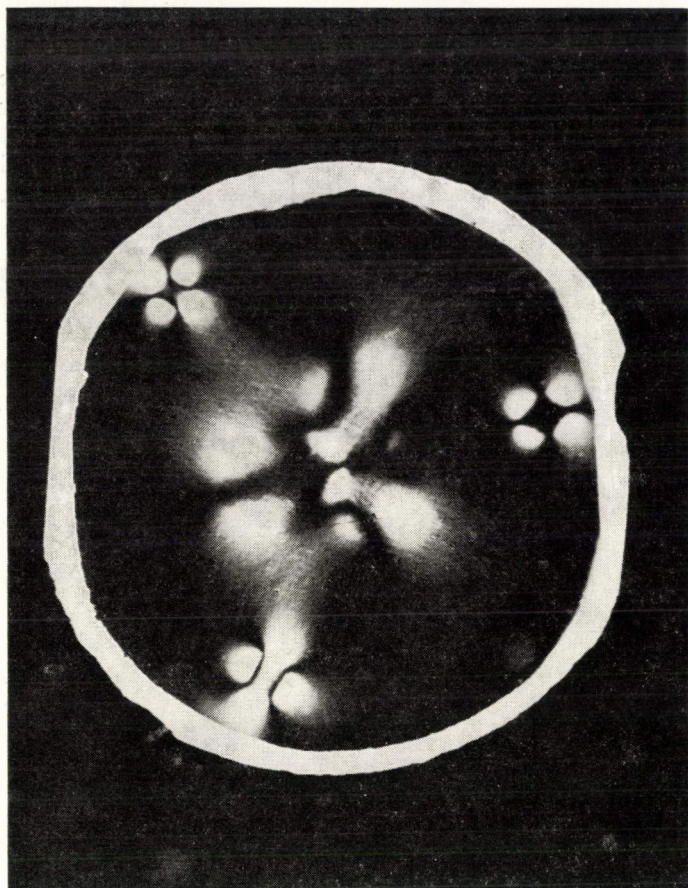
benyúlik, és egy kúpos növekedési front alakul ki. Ezt mutatja a 2. ábra. Az ábrán látható kristálynövesztés közben kiemeltük az olvadékból, hosszmetsetet készítettünk és polarizációs fényben megvizsgáltuk. Látható, hogy a kúpos növekedési fronttal párhuzamosan, növekedési csíkok jönnek létre az egyenlőtlen növekedés miatt. A növekedési sebesség ingadozása kismértékű összetélingadozáshoz vezet. A kúpos növekedési fronton fazetták (természetes kristálylapok) alakulnak ki, melyek szintén belső feszültséget eredményeznek. Jól látható még egy, a növekedési frontra merőlegesen növvő diszlokáció feszültségtere is.



3. ábra

A 3. ábrán a növekedési fronton kialakult  $\{110\}$  típusú fazetták láthatók. A 4. ábra a növekedési irányra merőlegesen készített metszet feszültségoptikai képét mutatja. A  $\{110\}$  és  $\{211\}$  típusú fazetták feszültségtere szembetűnő. Klapper [2] kimutatta, hogy szerves kristályoknál a diszlokációk a növekedési frontra merőlegesen nőnek. A 2. ábra azt mutatja, hogy ez GGG-ben is így van, ezért felhasználható arra, hogy a diszlokációkat a kristályból kinövelesszük. A baj csupán az, hogy ilyen





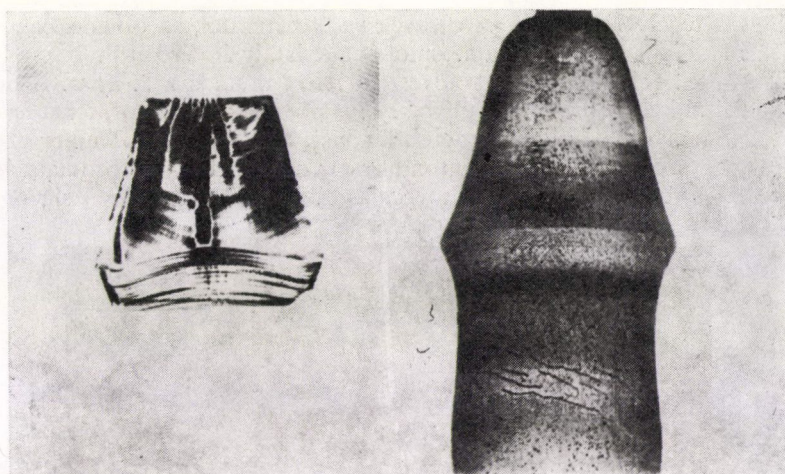
4. ábra

körülmények között a kristály diszlokációmentes lesz ugyan, de sok mechanikus feszültséget tartalmaz.

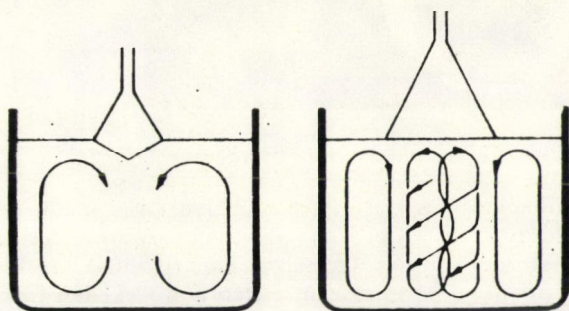
Cocayne [3] kimutatta YAG-ra, hogyha a kristály fordulatszámát a növesztés közben erősen megnöveljük, a kúpos növekedési front kisimul, és az ezzel járó feszültségesnövekedés megszűnik. Ilyet mutat az 5. ábra.

Mi történik itt valójában? Ezt szemlélteti a 6. ábra. Ha a kristályt lassan forgatjuk, az olvadékban csupán a természetes termikus konvekció alakul ki, és a már bemutatott kúpos növekedési front jön létre. Ha a kristály fordulatszámát megnöveljük, a forgó kristály mindinkább úgy működik, mint egy centrifugál szivattyú, és a tégely közepétől kifelé egy radiális irányú áramlást eredményez. Amikor ez az áramlás a termikus konvekciót túlkompenzálja, az áramlás a tégelyben megfordul és az ábrán bemutatott új áramlaskép alakul ki a tégelyben. Ennek következtében a kristály alól forróbb olvadék áramlik a kristály felé, a kúpos növekedési front leolvad, és a kristály új növekedési fronttal nő tovább. A leolvadás, ill. az új növekedési front

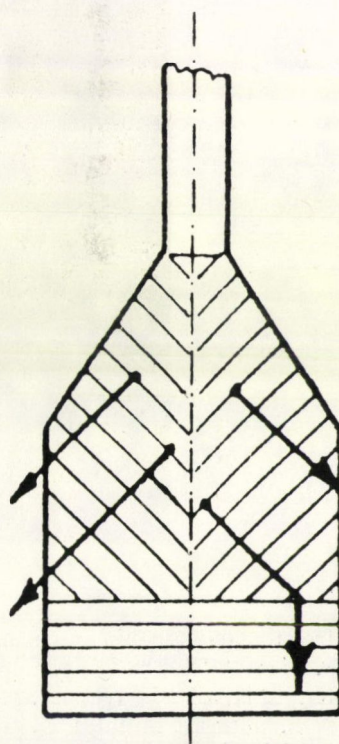




5. ábra



6. ábra

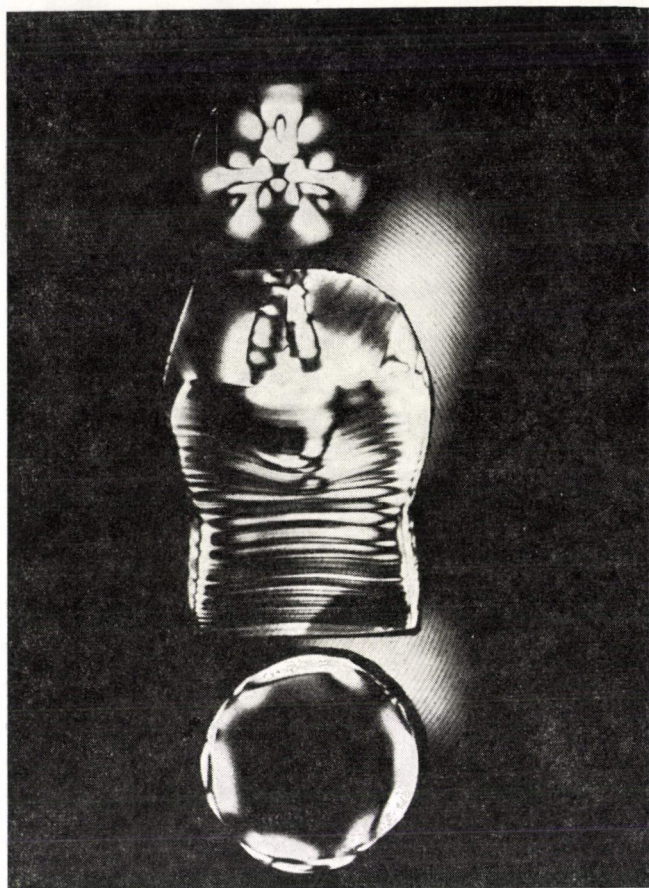


7. ábra



alakja függ a tégely méretétől, az olvadék viszkozitásától, az olvadékban kialakult hőmérsékletgradienstől, a fordulatszámtól és a kristály átmérőjétől.

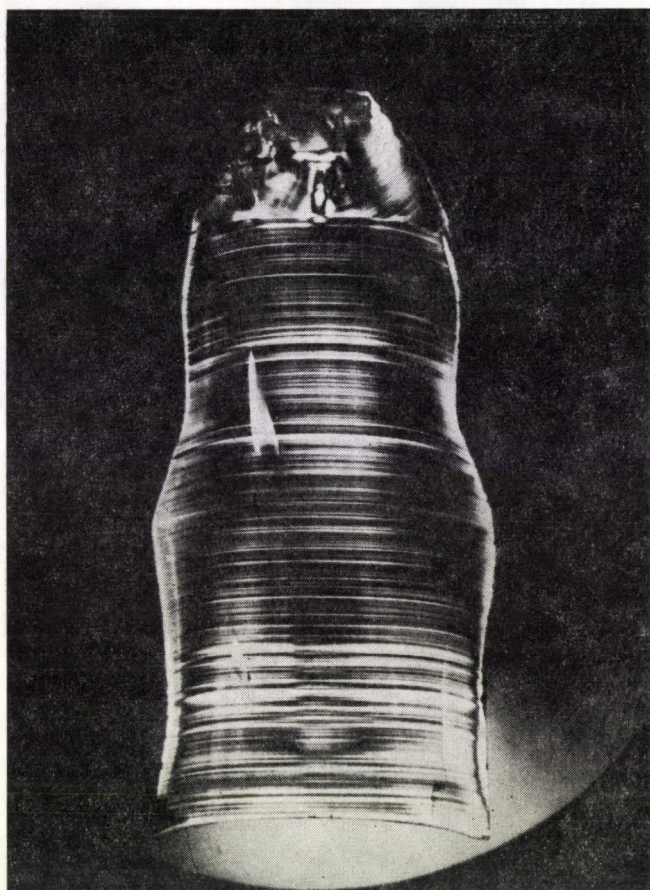
Hogyan kell tehát a kristályt növesztetni? Ezt mutatja a 7. ábra. A növesztést lassú fordulattal kell kezdeni, ami ugyan kúpos növekedési frontot, tehát feszültséges kristályt eredményez, de a diszlokációk kinőnek a kristályból. Amikor ez megtörtént — és ez egyszerű geometriai megfontolással számolható —, a fordulatszámot meg kell növelni. A fordulatszám kellő megválasztásával jó közelítéssel sík növekedési



8. ábra

front alakítható ki, ami már feszültségmentes kristályt eredményez. Ezt mutatja a 8. ábra. A felső metszeten látszik, hogy a kristály erősen feszültséges. A hosszszelvényen jól látszik a leolvadás, az alsó metszet középső része már teljesen feszültségmentes. A 9. ábra azt mutatja, hogy nagyon nagy fordulatszám esetén a növekedési front konkávvá válik, ami a még ki nem nőtt, vagy a kristály felületén keletkező diszlokációkat, mint egy homorú tükör reflektálja a kristály belseje felé.

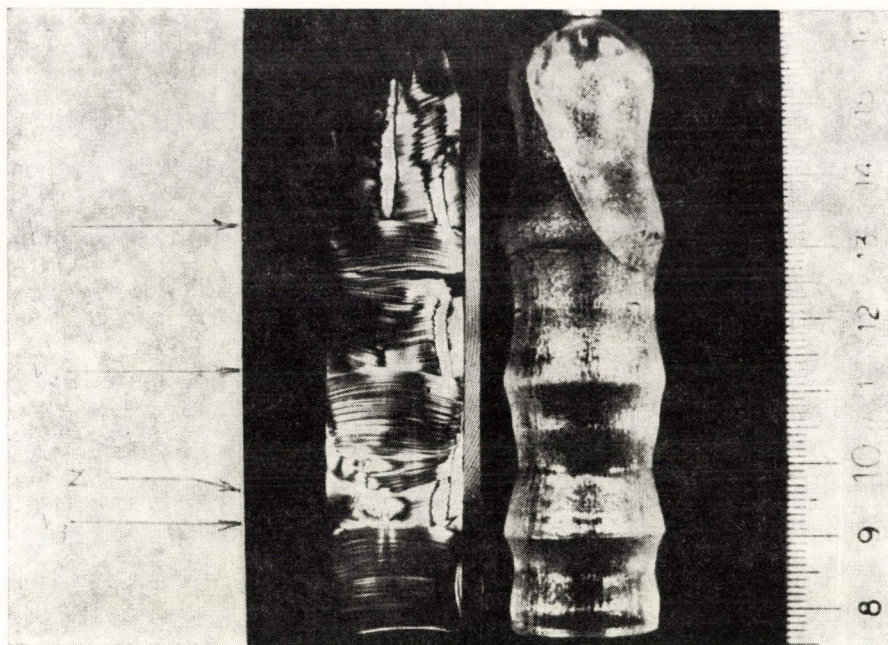




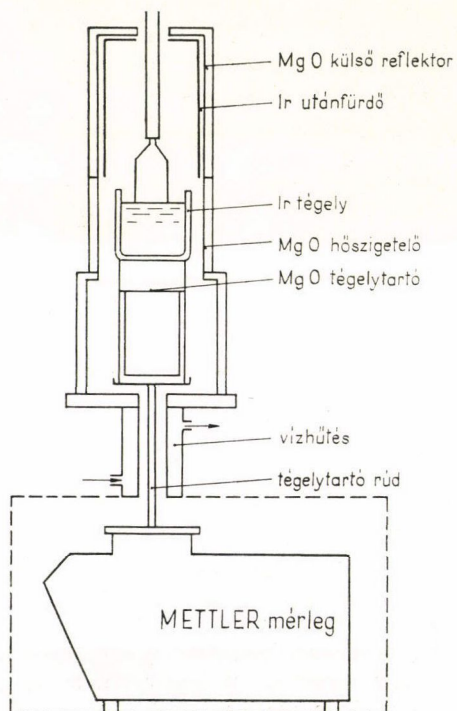
9. ábra

Nagyon lényeges az a felismerés, hogy egy növesztésen belül a növekedési front alakja csak a kristály fordulatszámától és átmérőjétől függ. A fordulatszámtól való függést már láttuk. A 10. ábra nagyon jól szemlélteti a kristály növekedésének egész történetét. Az egyik kép a kristály alakját, a másik a növekedési front alakjának változását mutatja. A kristályt az említett programnak megfelelően lassú fordulattal kezdtük növeszteni. Amikor a diszlokációk kinőttek és a kristály átmérője megfelelő volt, megnöveltük a kristály fordulatszámát. A növekedési front megváltozott a már elmondott módon. Ettől kezdve a fordulatszámot állandó értéken tartottuk és csak a kristály átmérője ingadozott. Amikor az átmérő lecsökkent, a keverő hatás is csökkent, ezért a növekedési front ismét kúposzá vált. Amikor a kristályátmérő ismét elérte azt az értéket, amelyhez a fordulatszámot beállítottuk, a növekedési kúp ismét leolvadt és a front síkká vált. Mint látható, ez a folyamat még egyszer megismétlődött és egy harmadik leolvadás is bekövetkezett.

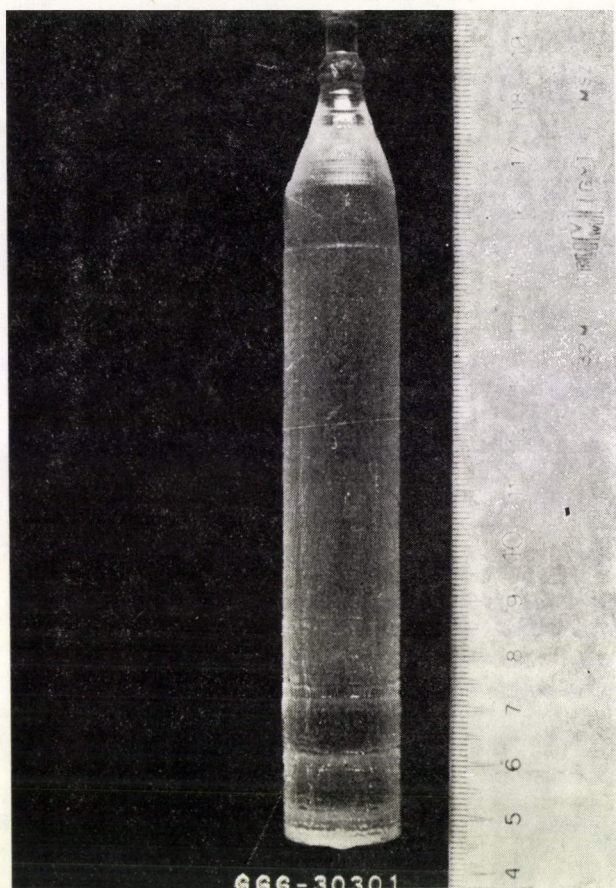




10. ábra



11. ábra



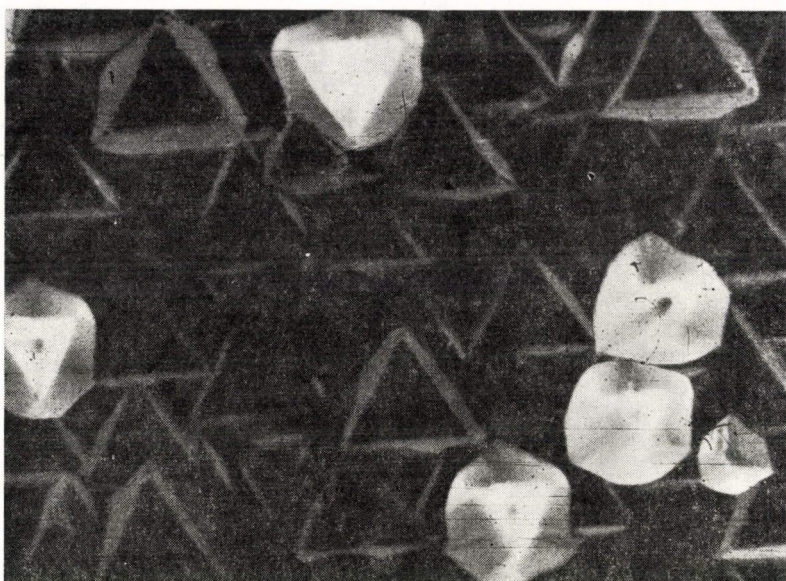
12. ábra

A bemutatott példán azt kívántuk igazolni, hogy az átmérő pontos beállítása és állandó értéken tartása a feszültségmentes, homogén, jó minőségű kristály elengedhetetlen feltétele. Az átmérő stabilizálása, más szóval az automatizált kristálynövesztés, nem kényelmi vagy luxuskérdés, hanem a reprodukálhatóan jó minőségű kristálynövesztés feltétele.

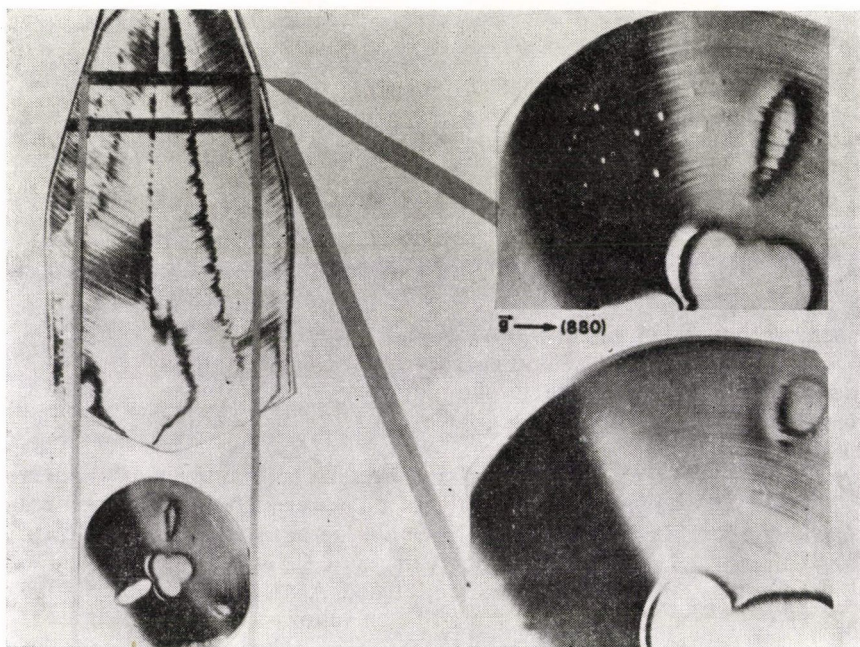
A számos lehetőség közül mi a kristálynövesztés automatizálását súlymérés alapján végezzük. A kristálynövesztő berendezés alá egy elektronikus mérleget építettünk be (11. ábra). A növesztő tégely a mérlegen áll, és a tégely súlycsökkenése a növekvő kristály súlyával arányos. A tégely súlyváltozását egy számítógép figyeli, és ennek alapján szabályoz vissza a növesztőberendezésbe. A 12. ábra egy automatikával növesztett kristályt mutat. A kristály átmérőjének változása 0,2 mm-nél kisebb.

A kristályok minősítése optikai, ill. feszültségoptikai, kémiai és röntgentopográfias vizsgálattal történik. Feszültségoptikai vizsgálatra már láttuk a példát.



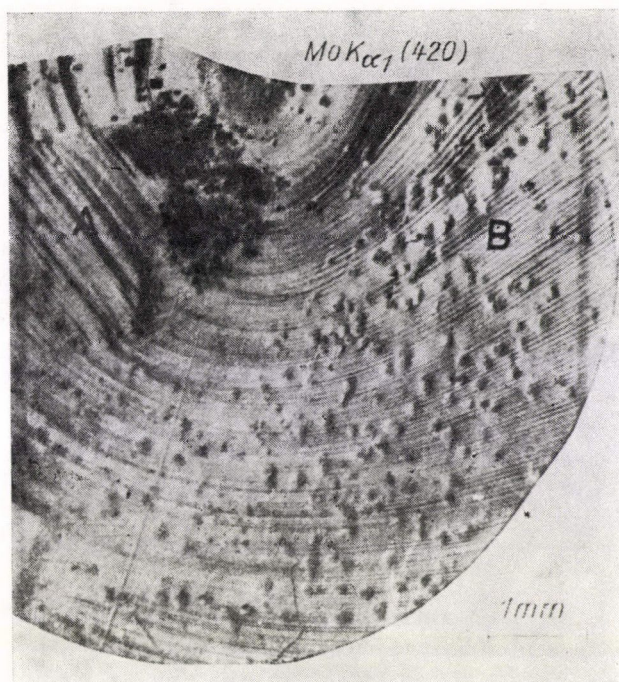


13. ábra

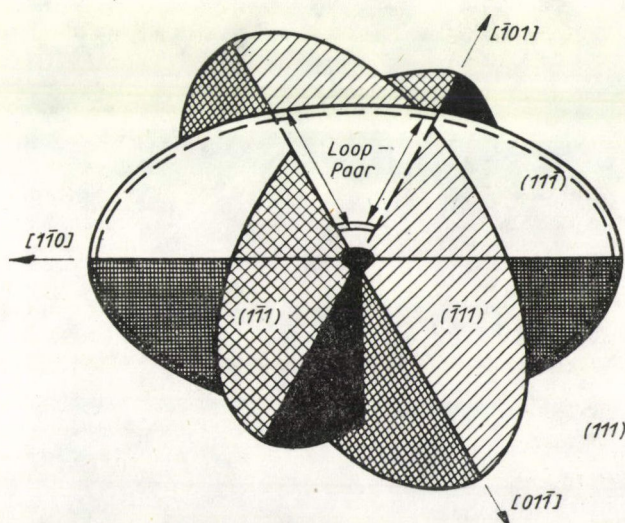


14. ábra



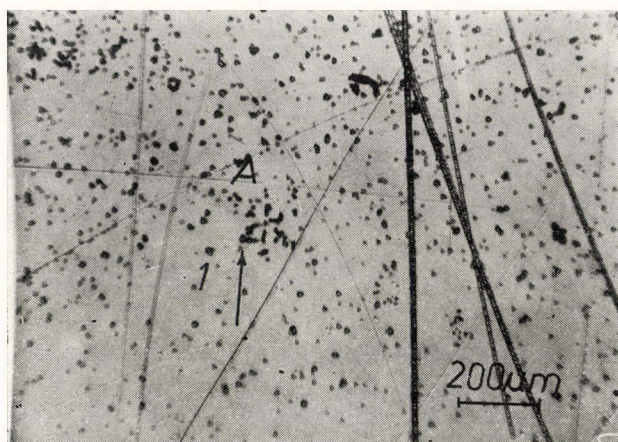


15. ábra

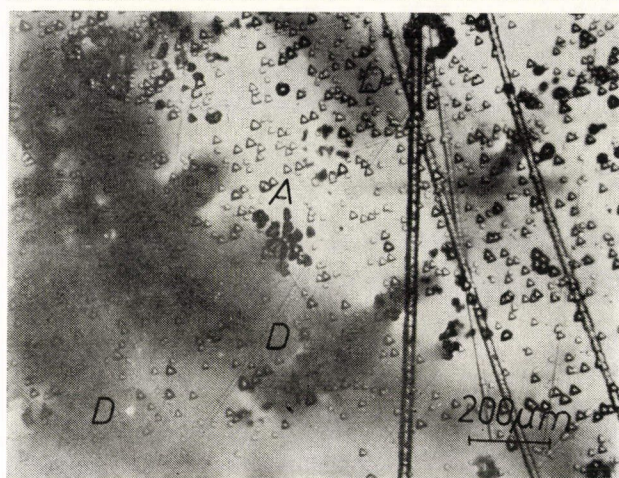


16. ábra

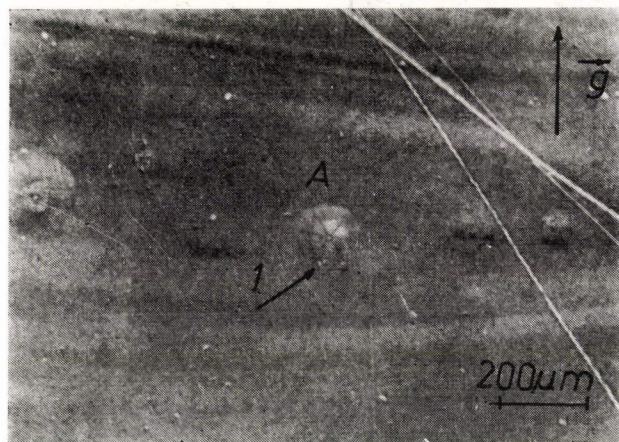




a)



b)



c)

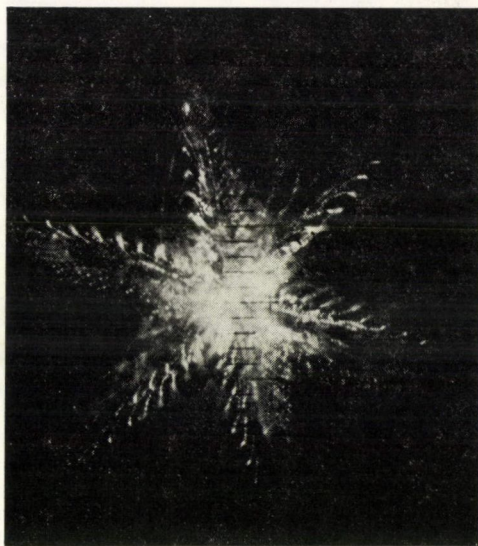
17. ábra



A 13. ábra egy kémiaileg megmart kristályszelet mikroszkópos képét mutatja. A világos háromszögek a mechanikus sérülések, a sötét háromszögek a diszlokációk marási gödrei. A 14. ábra a kristály feszültséges részének feszültségoptikai és röntgentopográfiás képét mutatja. A röntgentopogramokon látható diszlokációs konfigurációkból nyomon követhető, hogy a diszlokációk valóban kifelé nőnek. A 15. ábrán bemutatott topogram egy hibás kristály összes hibatípusát, mechanikus karcot, diszlokációt és zárványt tartalmazza. A képen látható nagy szemölcszerű alakzatok óriás rácshibák, átmérőjük 100  $\mu\text{m}$  nagyságrendű, három csoportba oszthatók. Ezek a következők:

1. Diszlokációgyűrűk konfigurációja (teljes, nem teljes)
2. Síkban fekvő spirál diszlokáció
3. Óriás helix diszlokáció.

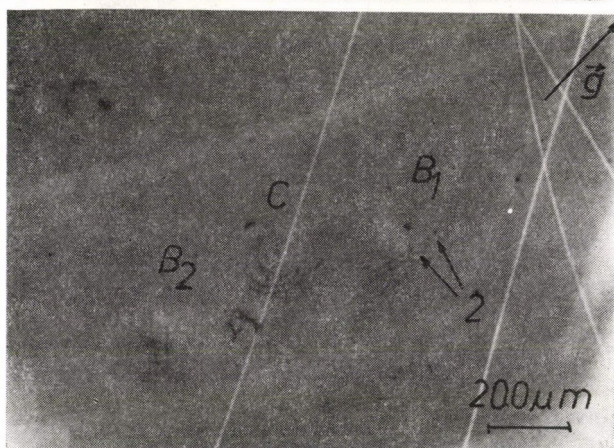
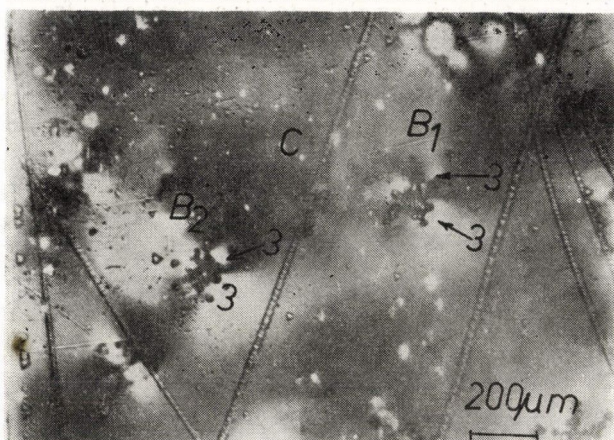
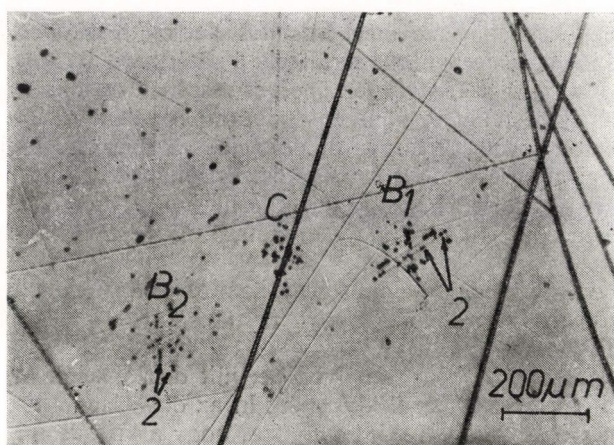
Ezek közös jellemzője, hogy a kristályba beépült diszlokációk méretéhez képest kicsi (néhány  $\mu\text{m}$   $\varnothing$ -jú) zárvány körül alakulnak ki az olvadásponthoz közeli hőmérsékleten (Matthews et al 1973). Tekintettel arra, hogy a kristály növekedési iránya  $\langle 111 \rangle$ , a növekedési front (111) sík, az alakzatok is a növekedési fronton, vagyis (111) típusú kristálytani síkokon keletkeznek. Diszlokációgyűrű-konfiguráció sematikus képe látható a 16. ábrán. Ez egy ún. teljes diszlokációgyűrű rendszer, mely mind a



18. ábra

4 db (111) síkon kialakult, ez a konfiguráció teljesen szimmetrikus. A 17. ábrán egy ilyen teljes diszlokációgyűrű konfiguráció látható, három vizsgálati módszerrel előállítva. A 17. a) kép egy optikai felvétel, kémiai marás után, a 17. b) polarizált fénnel készült felvétel (a hiba teljesen szimmetrikus alakzat, ezért feszültségtere nincs), a 17. c) kép pedig reflexiós röntgentopogram. A 18. ábrán egy ilyen teljes konfiguráció ultramikroszkópos képe látható. (R. Schalge et al. 1977.)

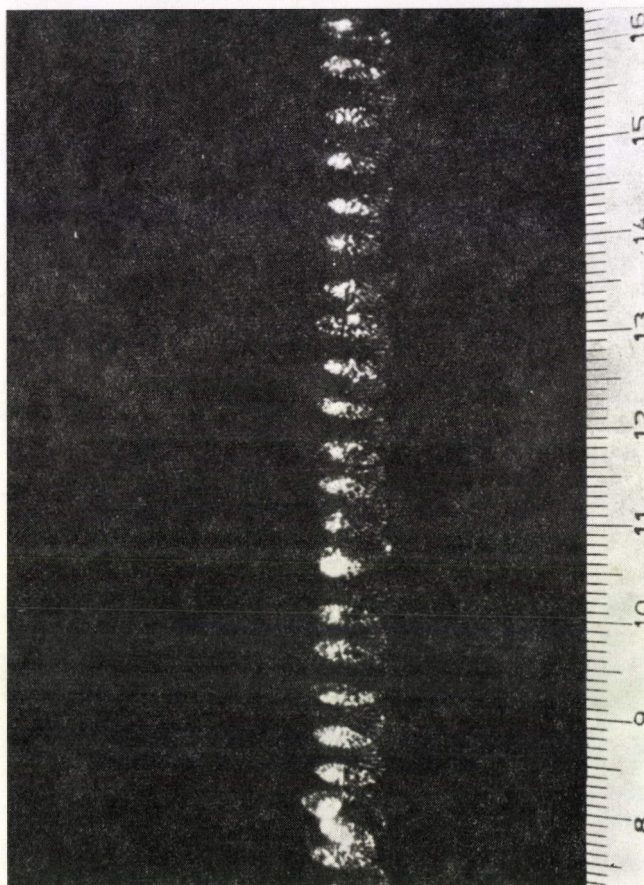




19. ábra



Előfordulhat azonban, hogy egy ilyen diszlokációgyűrű konfiguráció nem teljes, vagyis nem mind a 4 db (111) sík gerjed, hanem valamelyik nem, vagy valamelyik többszörösen. Előfordulhat az is, hogy a keletkezéskor a diszlokációgyűrű nem záródik, hanem egy síkban fekvő spirál keletkezik. E két utóbbi rácshibát láthatjuk a 19. a)–19. c) ábrán ( $B_1$ ,  $B_2$  nem teljes loopkonfigurációk, C spirál diszlokáció). Ezen az ábrán is mindhárom módszerrel történt leképezés látható. A nem teljes diszlokáció-



20. ábra

gyűrű konfiguráció feszültségképe a polarizációs mikroszkópban készült felvételen jól látható.

A harmadik óriás rácshiba a helix, mely átmérőben 100  $\mu\text{m}$  körüli, hossza több cm is lehet. Ez nem más, mint egy hatalmas csavardiszlokáció. A 20. és 21. ábrán látható egy ilyen helix oldalnézetben készült ultramikroszkópos képe (R. Schälge



et al 1977) és röntgentopogramja. A 22. és 23. ábrákon a helix tengelyére merőlegesen készült röntgentopogram és kémiai marás utáni optikai felvétel látható.

Az itt bemutatott diszlokációk a GGG-ben előforduló legjellegzetesebb rácshibák. Jelenlétük természetesen — bármilyen szép képeket is lehet róluk csinálni — nem

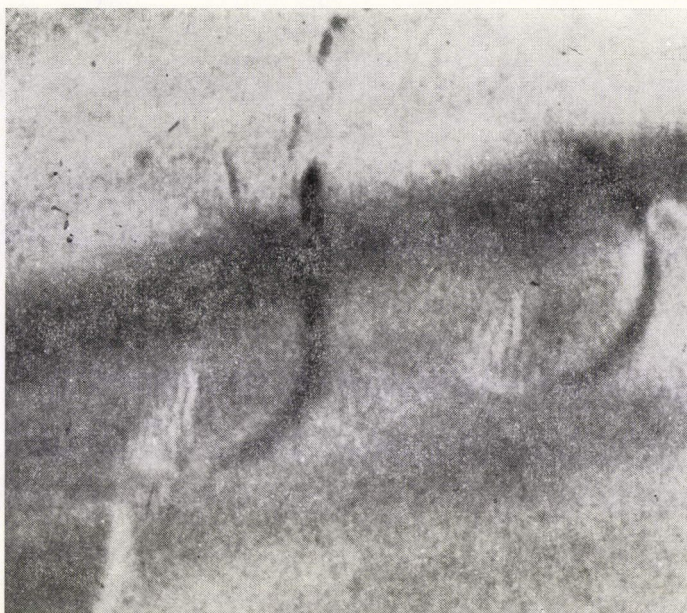


21. ábra

kíváncsi, mert az ilyen hordozóra készített buboréktároló működését ezek a hibák megzavarják.

Végezetül bemutatunk egy tökéletes kristályról készült röntgentopogramot, 24. ábra, mellyel kísérleti munkánk eredményességét kívánjuk demonstrálni.



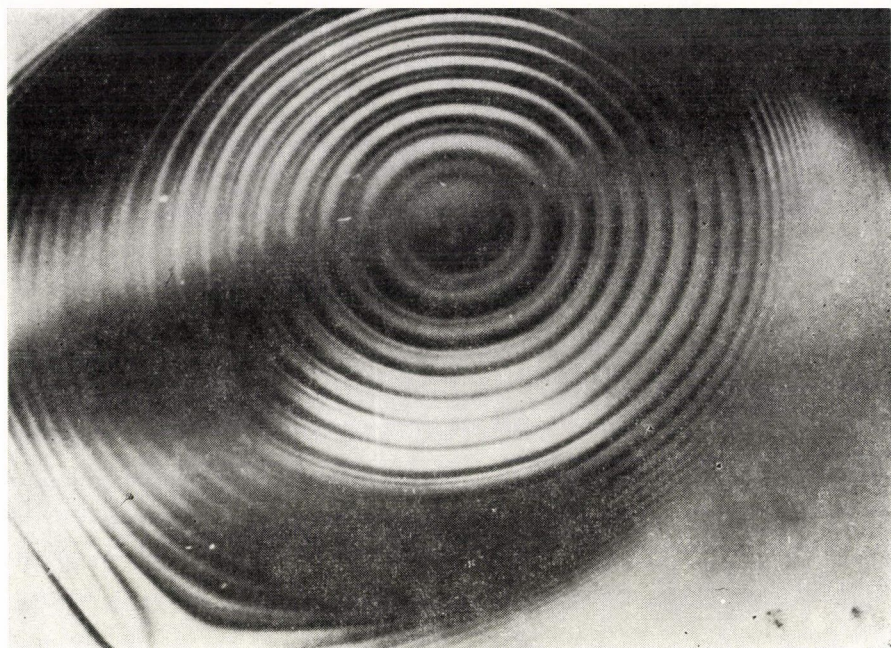


22. ábra



23. ábra





24. ábra

## IRODALOM

1. Menzer Z. F., Kristallografie 63, 157—8, 1926.
2. Klapper, J. Crystal Growth 13, 10, 1971.
3. B. Cocayne, J. Crystal Growth 3, 4, 60, 1968.
4. I. W. Matthews et al., Acta Met. 21, 203, 1973.
5. C. Becker et al. Phys. Stat. Sol. (a) 34, 519, 1976.
6. R. Schalge és P. Reiche magánközlemény 1977.



# MOZGÓ DISZLOKÁCIÓK ÉS PONTHIBÁK KÖLCSÖNHATÁSÁNAK VIZSGÁLATA IONKRISTÁLYOK PLASZTIKUS DEFORMÁCIÓJÁNÁL FELLÉPŐ ELEKTROMOS EFFEKTUSOK MÉRÉSÉVEL

TÓTH ANDRÁS és SÁRKÖZI JÓZSEF

Budapesti Műszaki Egyetem, Fizikai Intézet, Kísérleti Fizika Tanszék, Budapest

## Bevezetés

Az anyagok plasztikus tulajdonságainak megértése szempontjából döntő fontosságú a plasztikus deformáció során lejátszódó elemi folyamatoknak — a különböző típusú kristályhibák keletkezésének, eltűnésének és egymással történő kölcsönhatásának — ismerete. Ezen folyamatok vizsgálatára viszonylag egyszerű kísérleti eljárást kínál az a tény, hogy a kristályok egyes típusaiban — elsősorban az ionkristályokban — a hibák jelentős effektív töltéssel rendelkeznek. Emiatt ezekben a kristályokban a plasztikus deformáció során bekövetkező hibamozgások elektromos töltés transzporttal járnak, ami makroszkopikusan észlelhető effektusokat eredményez. Ezek elemzésével az elemi hibakölcsönhatási folyamatokra vonatkozó új információkhoz juthatunk [1—4].

Az alábbiakban két — ionkristályokban észlelhető — elektromos effektussal kapcsolatos vizsgálatainkról számolunk be. A két effektus az irodalomban Sztjepanov-effektus [5], illetve Gyulai—Hartly-effektus [6] néven ismeretes.

## 1. Sztjepanov-effektus

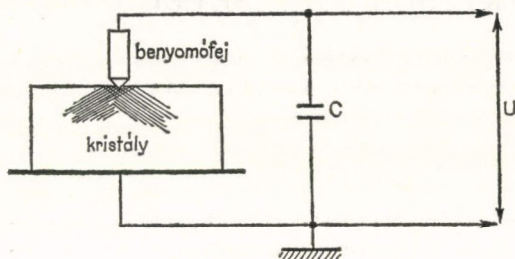
Sztjepanov idézett vizsgálatai óta igen nagyszámú publikáció [1] bizonyítja, hogy az ionkristályok inhomogén deformációjánál a kristály különböző pontjai között elektromos potenciálkülönbség jelenik meg (Sztjepanov-effektus). A jelenség azzal kapcsolatos, hogy a plasztikus deformáció során létrejött és elmozduló diszlokációk elektromos töltést szállítanak, melyre útjuk közben tesznek szert töltött ponthibák felszedésével. Tudjuk, hogy NaCl típusú kristályokban ezek a ponthibák vakanciák, felszedésük és szállításuk mechanizmusára vonatkozóan azonban igen keveset tudunk [1]. Az mindenesetre feltételezhető, hogy a felszedett töltés függ a kristályban levő vakanciák koncentrációjától, s amennyiben a folyamat termikusan aktivált, akkor a hőmérséklettől is. Vizsgálataink ezeknek a kérdéseknek a tisztázására irányultak.

### 1.1 Kísérleti technika

A plasztikus deformáció során jelentkező elektromos potenciálkülönbség mérése lehetővé teszi a diszlokációk által szállított töltés kiszámítását [1]. A többféle használatos módszer közül mi egy általunk kidolgozott [7—9] és az irodalomban elfogadást nyert [1] módszert használtunk. Ennek lényege az, hogy a kristály felületén acélgúlóval



pontszerű benyomatot hozunk létre, s mérjük a benyomófej és a kristályt tartó földelt fémlemez között létrejött potenciálkülönbséget (1. ábra). Ezután a benyomat, illetve a körülötte kialakuló és kémiai maratással láthatóvá tett „diszlokációs rozetta” méreteinek felhasználásával becsüljük az egységnyi hosszúságú diszlokáció szakasz által szállított töltést.



1. ábra. A diszlokáció töltés mérésére szolgáló berendezés vázlata

A diszlokáció töltés és a kristályban levő vakanciakoncentráció közötti összefüggés megállapításához meg kellett határoznunk a vakanciakoncentrációt is. Mivel a használt NaCl-kristályokban két vegyértékű kation szennyezések voltak, a kétféle vakancia közül csak a kation vakanciák játszhattak szerepet. Ezek koncentrációját a minták mért ionvezetőképesség-értékéből számítottuk.

Mivel korábbi vizsgálataink [10] azt mutatták, hogy a kristályok növesztési körülményei a diszlokáció töltést lényegesen befolyásolhatják, speciális módon előállított [11] OH-mentes NaCl-kristályokat használtunk, melyek gyakorlatilag csak a szándékosan bevitt kétvegyértékű kation szennyezést tartalmazták (az egyéb szennyezések mennyisége kisebb, mint  $2 \cdot 10^{-7}$  mol/mol). Egy adott minta csak egyféle szennyezést tartalmazott, az alkalmazott szennyezéseket az alábbi táblázatban foglaltuk össze:

Kristály	Szennyező	Koncentráció (mol/mol)
NaCl	Ca	$2 \cdot 10^{-7}, 10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}$
	Sr	$10^{-5}$
	Mg	$10^{-5}$
	Mn	$10^{-5}$
	Pb	$10^{-5}$
	Ba	$10^{-5}$

## 1.2 Eredmények és diszkusszió

A kation vakanciák koncentrációjának a diszlokációk által szállított töltésre gyakorolt hatását — az esetleges mellékes effektusok kiküszöbölése céljából — úgy vizsgáltuk, hogy a vakanciakoncentrációt négy — egymástól független — módszerrel változtattuk: 1. Változtattuk egy adott típusú két vegyértékű kationszennyezés — esetünkben a  $\text{Ca}^{2+}$  — koncentrációját. 2. Körülbelül azonos koncentráció ( $\approx 10^{-5}$  mol/mol) mellett változtattuk a szennyezés típusát. 3. A  $10^{-3}$  mol/mol  $\text{Ca}^{2+}$  szennyezést tartalmazó mintákat különböző hőmérsékleteken 3 órán át hőkezeltük, majd



szobahőmérsékletre edzettük. (A töltés és az ionvezetőképesség mérése ezekben az esetekben szobahőmérsékleten történt.) 4. A 25–200 °C hőmérséklet tartományban változtattuk a mérési hőmérsékletet  $10^{-5}$  mol/mol  $\text{Ca}^{2+}$  szennyezést tartalmazó mintáknál.

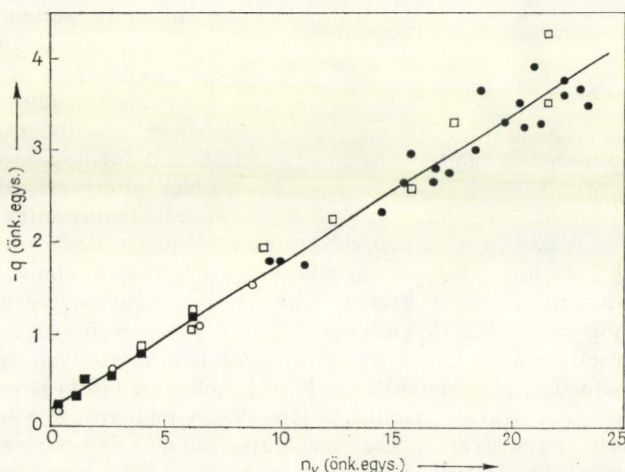
A felsorolt esetekben kapott mérési eredményeket a 2. ábra mutatja. Mint látható, a töltés közelítőleg lineárisan változik a szabad kation vakanciák koncentrációjával.

A fenti eredmény kvalitatív értelmezése a *Whithworth* által javasolt kinetikai modell [12] alapján történhet [13]. Ennek alapgondolata az, hogy a mozgó diszlokáción bizonyos út befutása után egy egyensúlyi töltés alakul ki, amelyet a diszlokációval ütköző kation vakanciákból felvett mennyiség és a különböző okokból leadott vakancia mennyiség egyenlőségéből kaphatunk meg. A kation vakancia felvételének valószínűsége feltehetőleg a kristályban levő szabad kation vakanciák koncentrációjával arányos. Ha feltesszük, hogy a vakancia elvesztése a ponthibáktól független, a diszlokáció saját, dinamikai tulajdonságaival összefüggő folyamat, a kialakuló egyensúlyi töltés ( $q$ ) — a mérési eredményekkel összhangban — arányos lesz a szabad kation vakanciák koncentrációjával ( $n_v$ ):

$$q \approx K \cdot n_v. \quad (1)$$

A  $K$  arányossági tényező függhet a diszlokáció sebességétől és a hőmérséklettől.

Mivel a  $K$  tényező a diszlokáció által okozott vakanciatranszport mechanizmusát jellemzi, hőmérsékletfüggésének vizsgálata a vakanciaszállítás mechanizmusának hőmérsékletfüggésére ad felvilágosítást. Mérési eredményeink szerint (2. ábra) a  $q(n_v)$  összefüggés független attól, hogy a mérés során változott-e a hőmérséklet vagy nem. Így a vizsgált hőmérséklettartományban a  $K$  tényező nem függ a hőmérséklettől,



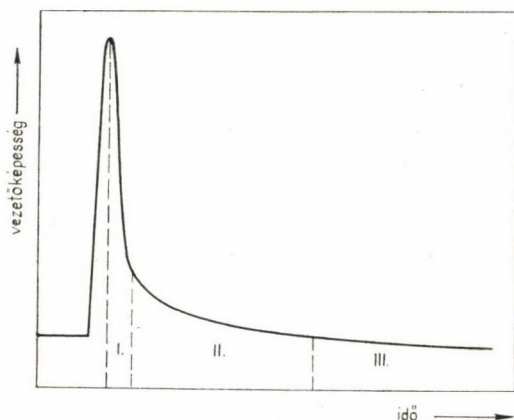
2. ábra. Az egységnyi hosszúságú diszlokáció szakasz által szállított töltés ( $q$ ) a kristályban levő szabad kation vakanciák koncentrációjának ( $n_v$ ) függvényében. (○ — különböző  $\text{Ca}^{2+}$  tartalmú minták; ● — hőkezelt minták; □ — különböző hőmérsékleteken mért minták; ■ — különböző típusú szennyezőt tartalmazó minták)



vagyis a diszlokációk a kation vakanciákat termikus aktiváció nélkül (vagy igen csekély — néhány század eV [14] — aktivációs energiával) szállítják. Ez egyben azt is jelenti, hogy ilyen hőmérsékleten a vakanciáknak a mozgó diszlokáció terében történő diffúziója nem játszik szerepet, azaz a vakanciák a diszlokáció magjában foglalnak helyet. A *Kolomijscev* által feltételezett vakancia — drift — mechanizmus [15] tehát a vizsgálat során előforduló diszlokáció sebességek mellett csak magasabb hőmérsékleten játszhat szerepet.

## 2. Gyulai—Hartly-effektus

Ismeretes, hogy egy ionkristályt elektromos térben deformálva, a kristály vezetőképessége több nagyságrenddel megnövekszik, majd a deformáció megszűnte után a többlet vezetőképesség fokozatosan eltűnik (Gyulai—Hartly-effektus). A vezető-



3. ábra. Hirtelen alkalmazott terhelés hatására bekövetkező vezetőképesség változás jellegzetes időbeli menete

képesség időbeli változását — hirtelen alkalmazott deformáció esetén — sematikusan a 3. ábra mutatja. A folyamat három időszakaszra bontható: a deformáció megszüntetését követő gyors vezetőképesség esés (I), egy lassú csökkenés (II), és egy olyan szakasz, ahol a vezetőképesség a deformáció előtti érték alá csökken (III). A jelenség részletes vizsgálata arra utalt [1], hogy valódi vezetőképesség növekedésről van szó, amely független az egyidejűleg esetleg megjelenő Sztjepanov-effektustól, s követi az Ohm-törvényt [16, 17]. Ez utóbbi tény alapján kézenfekvőnek látszik az a következtetés, hogy a deformáció során valamilyen többlet töltéshordozók keletkeznek, amelyek azután eltűnnek.

Hosszú időn át az volt az elképzelés, hogy a többlet töltéshordozók kation vakanciák [17, 18]. Úgy tűnik, hogy ez az elképzelés alkalmas a jelenség II. és III. szakaszának magyarázatára, de a kezdeti szakasz ilyen értelmezésével kapcsolatban igen sok nehézség merült fel. A kation vakanciák diffúziósebességének ismeretében ugyanis nem érthető, hogy a lecsengés kezdeti szakasza miért ilyen gyors, s a relaxációs idő miért nem függ a hőmérséklettől [19]. Emellett az effektus nagyságának hőmérsékletfüggését sem sikerült értelmezni [16, 19]. A fenti furcsa viselkedés magyarázatára számos — úgyszólván teljesen megalapozatlan — feltevés született a töltéshordozók mibenlétét illetően (pl. elektronok, rácsközi ionok, crowdionok), míg végül *Whitworthnak* [1] sikerült egy igen egyszerű modell segítségével szinte az összes felfedezett problémát megoldani. A modell alap gondolata az, hogy az effektus első — gyorsan lecsengő — szakaszát nem többlet töltéshordozók, hanem a vezetőképesség mérésnél alkalmazott elektromos térben mozgó töltött diszlokációk okozzák. Az elektromos tér hatására ugyanis a deformáció közben ellenkező irányban mozgó



ellentétes mechanikai előjelű (de azonos elektromos töltésű) diszlokációk között sebességkülönbség jön létre, s ez eredő töltésáramot okoz. Ez az áram természetesen a deformáció megszűnése után azonnal eltűnik, mégpedig a hőmérséklettől függetlenül. A modellel értelmezhető az Ohm-törvénynek megfelelő viselkedés is, ugyanis a többletáram arányos a térerősséggel. A modellből azonban az is következik, hogy a többletáram ( $I$ ) arányos a deformáció sebességével is

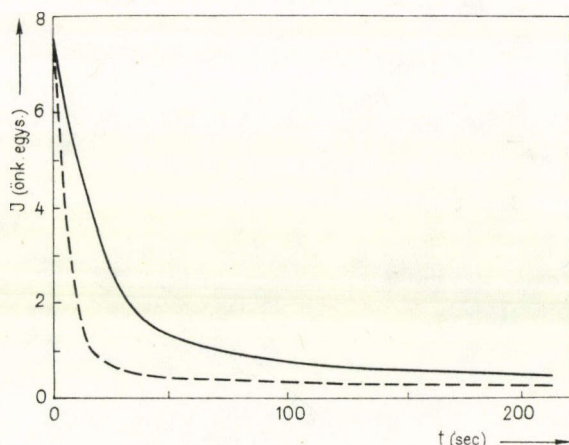
$$I = K' \cdot \dot{\epsilon} \quad (2)$$

ahol  $K'$  egy, a diszlokáció töltéstől és a kristály plasztikus tulajdonságaira jellemző adatoktól függő szám (adott kristály esetén állandó).

A Gyulai—Hartly-effektusra vonatkozó vizsgálatainkban ennek a — modellből következő — arányosságnak a kísérleti ellenőrzését tűztük ki célul.

## 2.1 Kísérleti technika

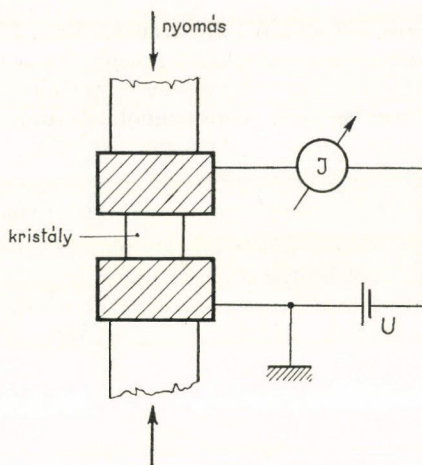
A (2) összefüggés vizsgálatára azt a kísérleti tapasztalatot használtuk ki, hogy a 3. ábrán látható lecsengési görbe függ attól, hogy a terhelést a kristályon hagyjuk, vagy a maximum elérésekor levesszük. Ezt a jelenséget mutatja a 4. ábra, ahol a folytonos vonallal kihúzott görbe a terheléssel, a szaggatottan rajzolt pedig a terhelés



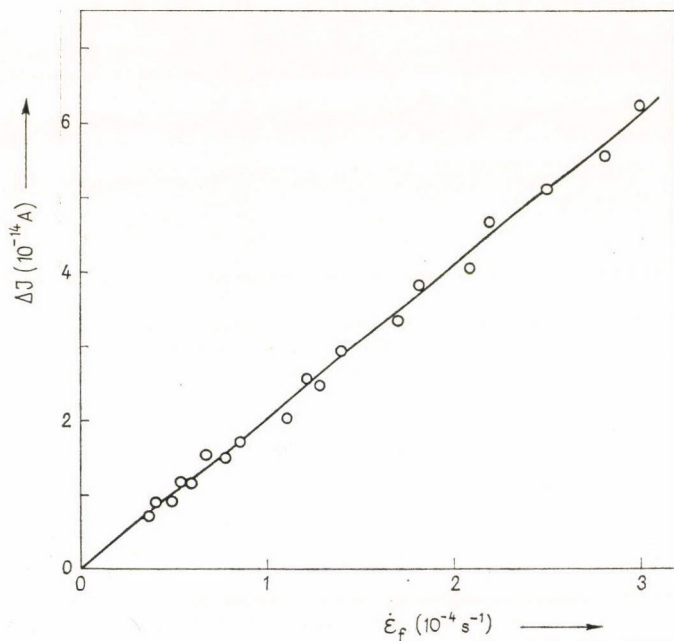
4. ábra. A többletáram ( $I$ ) lecsengése terhelte (kihúzott görbe) és terheletlen (szaggatott görbe) állapotban

levételével mért lecsengés. A magyarázat nyilván az, hogy a terhelés hatására a kristályban folyás indul meg, amely a diszlokációk további mozgásával jár, s ez okozza a többletáramot a terheletlen állapothoz képest. Ha tehát a (2) összefüggés igaz, akkor a két esetben mért áram  $\Delta I$  különbsége a folyási deformáció sebességével  $\dot{\epsilon}_f$  arányosan változik az idő ( $t$ ) függvényében:

$$\Delta I(t) = K' \cdot \dot{\epsilon}_f(t). \quad (3)$$



5. ábra. A Gyulai—Hartly-effektus mérésére szolgáló berendezés vázlata



6. ábra. A terhelt és terheletlen esetben létrejött áramok különbsége ( $\Delta I$ ) és a folyási sebesség ( $v_f$ ) összefüggése. Az egyes pontok időben összetartozó értékpárokat mutatnak.



Az áram mérése az 5. ábrán látható elrendezésben rezgőkondenzátoros elektrométerrel történt, a deformációt — emelő-áttételt alkalmazva — mérőórával határoztuk meg. A méréseket 50 °C hőmérsékleten végeztük.

A vizsgálatokhoz „tisztá” NaCl-kristályokat (szennyezés kisebb, mint  $2 \cdot 10^{-7}$  mol/mol) használtunk.

## 2.2 Eredmények és diszkusszió

Az 5. ábrán néhány mérés eredményeit tüntettük fel. A pontokat úgy kaptuk, hogy a terhelt és terheletlen állapotban mért áramok különbségének ( $\Delta I$ ), illetve a folyási deformáció sebességének ( $\dot{\epsilon}_f$ ) időbeli változását mértük, majd a függőleges és vízszintes tengelyen a  $\Delta I(t)$  és  $\dot{\epsilon}_f(t)$  összetartozó értékpárjait mértük fel. A két mennyiség arányossága elég jól teljesül.

A fenti kísérleti eredmény alátámasztja a Whithworth által kapott összefüggés helyességét, közvetve tehát azt a feltevést, hogy a Gyulai—Hartly-effektus I. szakasza nem valódi vezetőképesség növekedés következménye, hanem a töltött diszlokációk elektromos térben történő mozgásával kapcsolatos.

## KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A szerzők köszönetet mondanak Dr. Voszka Rudolfnak, aki a vizsgálatokhoz szükséges egy-kristályokat rendelkezésükre bocsátotta.

## IRODALOM

1. R. W. Whitworth, Adv. Phys. 24, 203, 1975.
2. G. Turchányi and I. Tarján, Acta Phys. Hung. 28, 291, 1970.
3. G. Turchányi, J. Janszky, M. Mátrai, I. Tarján, Kristallografia, 17, 426, 1972.
4. G. Turchányi, M. Mátrai, J. Janszky and I. Tarján, Acta Phys. Hung. 35, 193, 1974.
5. A. V. Stepanow, Z. Phys. 81, 560, 1933.
6. Z. Gyulai und D. Hartly, Z. Phys. 215, 256, 1928.
7. A. Tóth and J. L. Kiss, phys. stat. sol. (a) 19, K61, 1973.
8. A. Tóth and J. Sárközi, phys. stat. sol. (a) 28, K93, 1975.
9. A. Tóth and J. Sárközi, phys. stat. sol. (a) 30, K193, 1975.
10. A. Tóth, J. Sárközi and R. Voszka, Periodica polytech. elec. Engng. 16, 205, 1972.
11. R. Voszka, I. Tarján, L. Berkes and J. Krajsovsky, Kristall und Technik 1, 423, 1966.
12. R. W. Whitworth, Phil. Mag. 15, 305, 1967.
13. A. Tóth and J. Sárközi, J. de Physique C7, 604, 1976.
14. A. Tóth, phys. stat. sol. (a) 33, K47, 1976.
15. A. I. Kolomijcev, Fiz. tverd. Tela 13, 1487, 1971.
16. P. Camagni and A. Manara, J. Phys. Chem. Sol. 26, 449, 1965.
17. J. Kiss, Acta Phys. Hung. 24, 241, 1968.
18. J. Kiss, Kristallografia 10, 890, 1965.
19. A. Tóth, nem publikált eredmények.





# HADRONOK NAGYENERGIÁS SZERKEZETE\*

NIEDERMAYER FERENC

ELTE, Elméleti Fizikai Tanszék, Budapest

## TARTALOMJEGYZÉK

I. Bevezetés .....	169
II. A parton modell és a lepton—hadron szórás kinematikája .....	171
III. Pozitívítási egyenlőtlenségek .....	179
IV. A mélyen rugalmatlan ütközésekben keletkezett hadronokról .....	184
V. A kvark fragmentáció kaszkád modellje .....	188
VI. A partonok izospinjéről .....	194
VII. A zsák-elmélet .....	197
VIII. Fragmentáció a zsák-modellben .....	200
Köszönetnyilvánítások .....	207
Irodalomjegyzék .....	207

## I. Bevezetés

Az erősen kölcsönható elemi részek sokaságát lényegesen áttekinthetőbbé tette a kvarkok fogalmának bevezetése. A kvarkokkal, ha nem is minden nehézség nélkül, meg lehetett magyarázni a hadronok kvantumszámait, alacsonyenergiás viselkedésüket. Az a tény azonban, hogy a kvarkokat az egyre növekvő energiákon sem sikerült megtalálni, nem kedvezett a kvark-hipotézisnek. A hadronok szubstruktúrája mind kétségesebbé vált, a kvarkokat kezdték úgy tekinteni, mint a hadronok kölcsönhatásaira jellemző szimmetriák matematikailag kényelmes eszközét. Bevezették a „hadron demokrácia” és a „bootstrap” fogalmát — amikor a részecskék kölcsönhatásainak jellemző adatai, általános matematikai követelmények segítségével (Lorentz-invariancia, analiticitás, unitaritás) meghatározzák egymást, anélkül, hogy valamilyen szubstruktúrára vonatkozó adatokat posztulálnánk.

Ezt a koncepciót változtatta meg a 60-as évek végén, és vezetett vissza ismét a hadronok elemi összetevőinek fogalmához egy kísérlet, amelyet joggal emlegetnek „korunk Rutherford kísérleteként”. A stanfordi lineáris gyorsítóban (SLAC) 20 GeV-es elektronokkal protonokat bombáztak, és a vártnál sokkal nagyobb hatáskeresztmetszetet észleltek. A magyarázat kézenfekvő volt: a proton pontszerű alkotórészekből, „partonokból” áll, hasonlóan ahhoz, ahogy a Rutherford kísérletből megtudtuk, hogy az atom közepében egy pontszerű atommag helyezkedik el.

A bombázó elektron energiája jóval nagyobb a hadronok gerjesztési energiájánál, így az egyes partonokról történő szórás inkoherens. Ezért a hatáskeresztmetszet

\* Érkezett 1978. január 24., Kandidátusi disszertáció



arányos a parton-töltések négyzetösszegével. Ezzel lehetőség nyílt a partonok töltéseinek és egyéb kvantumszámainak „közvetlen” mérésére. Természetesen azt reméljük, hogy a nagyenergiás szórásokban látott partonok megegyeznek az alacsonyenergiás tulajdonságok magyarázatára bevezetett kvarkokkal.

A partonokba vetett hit annyira megerősödött, hogy fel lehetett tenni a logikusan következő kérdést: mit csinál a kvark-parton, miután egy virtuális foton kiüti társai közül? Mi az a folyamat, amely a végállapotban észlelt elemi részek produkciójához vezet? Ezekre a kérdésekre próbál választ adni Feynman parton-fragmentációs hipotézise, és egyben további lehetőségeket kínál a partonok megismerésére.

A partonok nemcsak a nagyenergiás lepton—hadron ütközésekben játszanak lényeges szerepet, hanem valószínűleg a nagyenergiás hadron—hadron ütközésekben is. Bár az ilyen folyamatok kiértékelése és elméleti tárgyalása bonyolultabb, több kísérleti tény és elméleti megfontolás alátámasztja ezt a hipotézist.

A parton-elmélet tanúsága szerint a partonok (kvarkok) kis tömegű objektumok, amelyek lényegében szabadon mozognak a hadron belsejében. Ez még jobban kielezi a régi problémát: miért nem keletkeznek különálló kvarkok a nagyenergiás folyamatokban? Az utóbbi időben ennek magyarázatára is biztató elméleti próbálkozások születtek. A különböző elméletek közül legteljesebb — egyszerűsége miatt — a „zsák-modell”. Ez egy relativisztikus elmélet, ahol a kvarkok egy véges térfogatú részben, a „zsákban” egymással nem túlságosan erősen kölcsönhatva mozoghatnak, és egyszerű megmaradási törvényekkel magyarázható, hogy egy zsákban miért nem lehet tetszőleges számú kvark. Ha egy matematikailag jól megfogalmazott kvantum-elmélet nem is áll még rendelkezésünkre, a zsák-modell segítségével szemléletes és egyszerű magyarázatot kap több érdekes jelenség, mint pl. a pomeron, a kvark fragmentáció, sőt az 1974. novemberében felfedezett és azóta egyre szaporodó  $\psi$  részecskék családja is.

A disszertáció a fentebb vázolt témakörökkel foglalkozik. Arra keres választ, hogy mit állapíthatunk meg a partonokról a jelenlegi kísérleti adatok segítségével; olyan új összefüggéseket ír fel, amelyek a parton-modell általános vagy speciálisabb feltevésein alapulnak, és amelyeket a közeljövő kísérleteiben ellenőrizni lehet.

A disszertáció felépítése a következő:

- Rövid bevezető a parton-modellbe. A parton-modellt magyar nyelven is több kiváló dolgozat tárgyalja [38, 39], így ez a rész csak a továbbiak megértéséhez szükséges kérdésekkel foglalkozik.
- A kvark parton-modellben egyenlőtlenségeket vezet le [14], amelyek összekapcsolják az  $eN$  és a  $\nu N$  mélyen rugalmatlan szórásban fellépő skálafüggvényeket.
- Egyszerű modellt javasol a kvark fragmentációra, amely a mélyen rugalmatlan szórás második fázisával foglalkozik — azzal, amikor a meglökött kvark a végállapotban észlelhető hadronokat emittálja [25]. A modell alapján összefüggéseket állapít meg a kvark fragmentációs függvények közt, és ezeket összeveti a kísérleti eredményekkel.
- A fragmentációs modell alapján összefüggéseket vezet le a keletkezett töltött és semleges pionok multiplicitására. Ezeket a lepton—hadron ütközésekben a kísérleti adatok hiánya miatt még nem lehet ellenőrizni, de a nagyenergiás hadron—hadron kísérleti eredményekkel meglepően jó egyezésben vannak [40].
- Röviden ismerteti a zsák-elmélet lényegét.
- Dinamikai modellt javasol a kvark fragmentáció leírására a zsák-elmélet alapján.

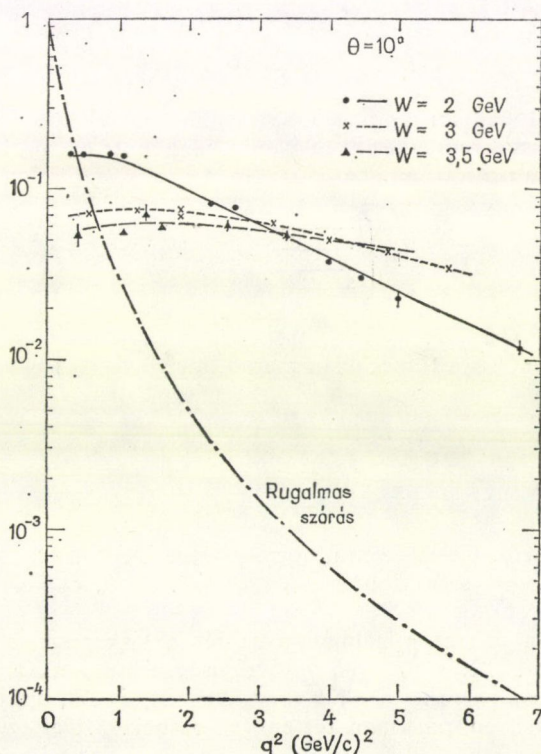


## II. A parton-modell és a lepton—hadron szórás kinematikája

Ha elektront szórunk egy összetett objektumon, pl. egy kristályon, két dolog történhet. Az elektron szóródhat a kristályrács egészén: az egyes rácspontokon szórt elektron-amplitúdók interferálnak egymással, diffrakciós képet kapunk. Ez az effektus dominál kis energiákon. Ha növeljük a bombázó elektronok energiáját, azok nagy valószínűséggel kilökik a kristályrácsból azt az atomot, amelyen szóródtak. Ekkor a különböző rácspontok által szórt elektron-állapotok a rendszer különböző végállapotaihoz tartoznak, így nem interferálnak egymással — a szórás inkoherens.

Koherens szórás segítségével megállapíthatjuk a kristályrács struktúráját, a nagyenergiás, inkoherens szórást viszont a kristályt alkotó atomok milyensége határozza meg, nem pedig térbeli elhelyezkedésük.

Hasonló a helyzet a protonnál is. A SLAC-MIT kísérletben [1, 2] 20 GeV-es elektronokat szórattak hidrogén céltárgyon, és mérték a szórt elektron szögét és energiáját. Kiderült, hogy a hatáskeresztmetszet nagy impulzusátadásnál, a mélyen rugalmatlan tartományban úgy viselkedik, mintha az elektron inkoherensen szóródna kis

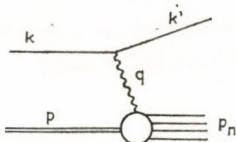


1. ábra Az  $e+p \rightarrow e+X$  folyamat hatáskeresztmetszete egy egységnyi töltésű pontszerű részecskén való szórás hatáskeresztmetszetéhez viszonyítva.  $q^2$  a virtuális foton tömeg-négyzete,  $W$  a végállapot hadronjainak invariáns tömege

tömegű pontszerű objektumokon, amelyeket *Feynman* után partonoknak nevezünk (l. az 1. ábrát). *Bjorken* [3] megjósolta a jelenséget, majd *Feynman* [4], *Bjorken* és *Paschos* [5], és sokan mások kidolgozták és továbbfejlesztették a parton-modellt.

A mélyen rugalmatlan  $ep$  szórást  $\alpha = e^2 = \frac{1}{137}$  szerinti legalacsonyabb rendben a következő gráffal ábrázolhatjuk:

$$q = k - k', \quad (2.1)$$



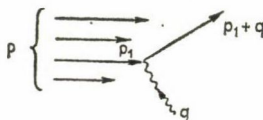
ahol  $k$  és  $k'$  a bemenő és kimenő elektron impulzusai,  $q$  a virtuális foton,  $p$  a proton impulzusa. A parton-kép akkor igaz, ha mind a virtuális foton energiája, mind a tömege nagy:

$$Mv \equiv pq \gg M^2,$$

$$-q^2 \ll M^2,$$

( $M$  a proton tömege).

Célszerű a folyamatot olyan rendszerből vizsgálni, amelyben a proton és a virtuális foton nagy impulzussal rendelkezik. Legyen a meglökött parton impulzusa az ütközés előtt  $p_1 = xp$  ( $p$  a proton impulzusa,  $0 < x < 1$ ):



A parton ütközés után is a tömeghéján marad, így

$$(xp + q)^2 \sim m_q^2,$$

vagyis

$$x \sim \frac{-q^2}{2pq} \equiv \frac{-q^2}{2Mv} \equiv x_B$$

( $x_B$  a Bjorken-változó). Ez azt jelenti, hogy a virtuális foton csak egy meghatározott  $xp$  impulzusú partonon szóródhatott. (A  $-q^2 \rightarrow \infty$ ,  $v \rightarrow \infty$ ,  $x_B = \text{const}$  határátmenet a Bjorken limesz.)

Ahhoz, hogy a mélyen rugalmatlan szórás hatáskeresztmetszetét megkapjuk, csak azt kell tudnunk, hogy milyen valószínűséggel találunk a protonban egy  $xp$  impulzusú és  $\alpha$  típusú partont (jelöljük ezt  $f_\alpha(x)$ -szel), és azt, hogy mekkora a hatáskeresztmetszete egy ilyen partonon történő szórásnak. Mivel egy ponttöltésen való elektromágneses szórás hatáskeresztmetszete a töltésnégyzettel arányos, így

$$\frac{d\sigma}{dx} \propto \sum_{\alpha} Q_{\alpha}^2 f_{\alpha}(x)$$

Ezzel lehetőség nyílik arra, hogy kimérjük a partonok töltéseit és impulzuseloszlását.



Hogy a parton—modell jóslatait a kísérleti eredményekkel összehasonlíthassuk, szükségünk lesz az elektron—nukleon és a neutrínó—nukleon szórás kinematikájára.

*Az  $e-p$  szórás kinematikája*

A (2.1) folyamatot leíró amplitúdó:

$$\langle k' \beta', p_n \text{ out} | k \beta, p \alpha \text{ in} \rangle = -ie^2 (2\pi)^4 \delta^4(p + k - p_n - k') \times \\ \times \frac{1}{q^2} \bar{w}_{\beta'}(k') \gamma^\mu w_\beta(k) \cdot \langle p_n \text{ out} | J_\mu(0) | p \alpha \rangle, \quad (2.2)$$

ahol  $\alpha, \beta, \beta'$  a megfelelő részecskék spinjei,  $w$  pedig az elektron Dirac-spinorja. Ha nem mérjük a kimenő elektron  $\beta'$  polarizációját, sem a  $p_n$  hadronikus végállapotot, akkor a hatáskeresztmetszet:

$$d\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{4} e^4 q^{-4} [(kp)^2 - m^2 M^2]^{-1/2} L_{\mu\nu}^\beta W_{\alpha}^{\mu\nu} \cdot \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3 2E'}. \quad (2.3)$$

Itt  $L_{\mu\nu}^\beta$  a leptonikus rész:

$$L_{\mu\nu}^\beta = \sum_{\beta'} \bar{w}_{\beta'}(k') \gamma_\mu w_\beta(k) \bar{w}_\beta(k) \gamma_\nu w_{\beta'}(k').$$

A folyamat számunkra érdekes részét a  $W_{\mu\nu}^\alpha$  hadronrész tartalmazza, amely a hadronikus végállapotokra való összegzés elvégzése után így írható:

$$W_{\mu\nu}^\alpha(p, q) = \int d^4 x e^{iqx} \langle p \alpha | [J_\mu(x), J_\nu(0)] | p \alpha \rangle. \quad (2.4)$$

Az elektromos áram megmaradása miatt  $W_{\mu\nu}^\alpha$  kifejtésében csak négy Lorentz-invariáns függvény szerepelhet [10, 11]:

$$W_{\mu\nu}^\alpha(p, q) = 4\pi M \left( \frac{q_\mu q_\nu}{q^2} - g_{\mu\nu} \right) \cdot W_1(q^2, \nu) + \\ + 4\pi M \cdot \frac{1}{M^2} \left( p_\mu - \frac{pq}{q^2} q_\mu \right) \left( p_\nu - \frac{pq}{q^2} q_\nu \right) \cdot W_2(q^2, \nu) + \\ + 2\pi i \varepsilon_{\mu\nu\alpha\sigma} q^\sigma \alpha^\sigma \cdot d(q^2, \nu) + 2\pi i (\alpha q) \varepsilon_{\mu\nu\alpha\sigma} q^\sigma p^\sigma \cdot g(q^2, \nu). \quad (2.5)$$

$W_1$  és  $W_2$  a SLAC-MIT mérésben vizsgált spinfüggetlen struktúrafüggvények;  $d$  és  $g$  csak polarizációs kísérletben mérhetőek — a megfelelő tagok spinre való átlagoláskor eltűnnek.

A spinre átlagolt hatáskeresztmetszet:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega dE'} = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{M \text{ ott}} \cdot \left( W_2 + 2 \tan^2 \frac{\theta}{2} \cdot W_1 \right), \quad (2.6)$$

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{M \text{ ott}} = \frac{\alpha^2 \cos^2 \frac{\theta}{2}}{4E^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}}.$$

A spinfüggő hatáskeresztmetszetekben  $d$  és  $g$  is fellép. Legyen  $\sigma^{\parallel}$  annak a folyamatnak a hatáskeresztmetszete, amikor a befutó elektron és a proton spinjei párhuzamosak és az elektron mozgásirányába mutatnak,  $\sigma^{\parallel}$  pedig ugyanaz antiparallel spinekre. Ekkor

$$\frac{d\sigma^{\parallel}}{d\Omega dE'} - \frac{d\sigma^{\perp}}{d\Omega dE'} = \alpha^2 \frac{2E'}{ME} \frac{1}{q^2} \{ (E + E' \cos \theta) d(q^2, \nu) + (E - E' \cos \theta)(E + E') M \cdot g(q^2, \nu) \}. \quad (2.7)$$

Mit mondanak a SLAC-MIT kísérlet adatai a spinfüggetlen struktúrafüggvényekről? Itt csak két fontos kísérleti eredményt említünk meg:

1.  $\nu W_2(q^2, \nu)$  és  $W_1(q^2, \nu)$  skálázik, azaz nagy  $q^2$ ,  $\nu$  értékre csak a

$$\xi = -\frac{q^2}{2M\nu}$$

változó függvénye:

$$\nu W_2(q^2, \nu) \rightarrow F_2(\xi),$$

$$2MW_1(q^2, \nu) \rightarrow F_1(\xi),$$

(lásd a 2. és 3. ábrát).

$W_1$  és  $\nu W_2$  skálázása erősen alátámasztja a parton-hipotézist: a parton-modellben, tehát független pontszerű részecskéken való szóráskor a struktúrafüggvények ugyanígy viselkednek.

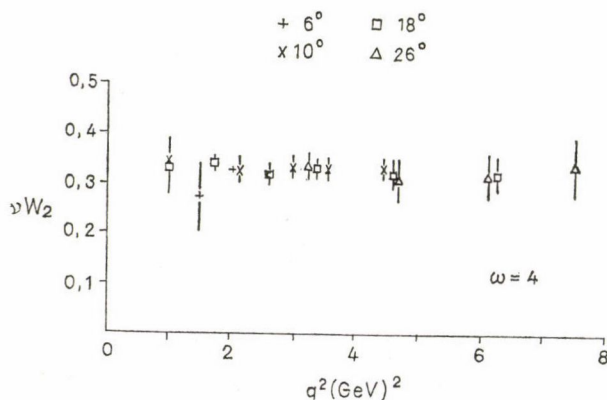
2. A kísérletek tanúsága szerint  $W_1 + \frac{\nu^2}{q^2} W_2 \rightarrow 0$ , a longitudinálisan és transzverzálisan polarizált foton abszorpciójának hatáskeresztmetszeteire fennáll, hogy

$$R \equiv \frac{\sigma_L}{\sigma_T} = \frac{W_2}{W_1} \left( 1 - \frac{\nu^2}{q^2} \right) - 1 \rightarrow 0 \quad (2.8)$$

a Bjorken limeszben. Másszóval, a két skálafüggvény nem független egymástól, hanem

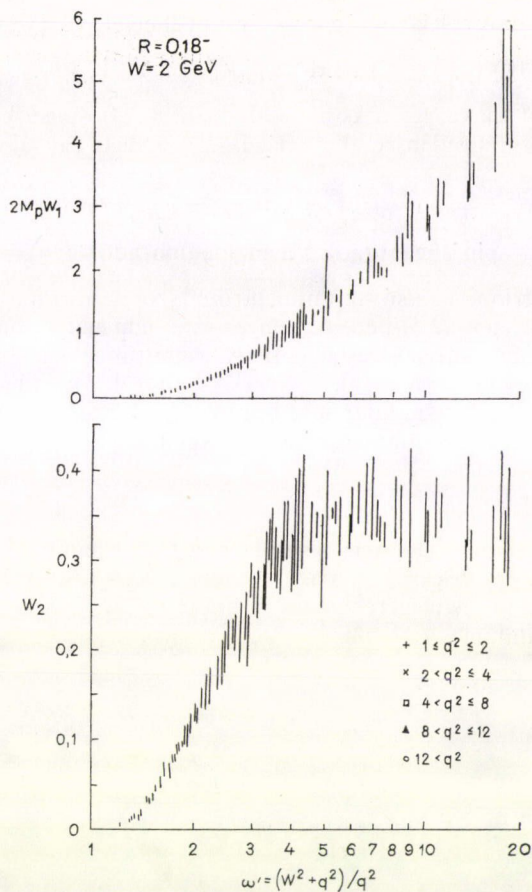
$$F_2(\xi) = \xi F_1(\xi).$$

Ez az ún. Callan—Gross [12] reláció, ami annak a következménye, hogy a partonok spinje 1/2.



2. ábra

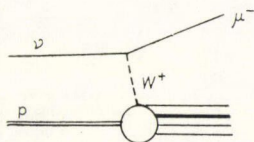




3. ábra

A  $\nu$ - $p$  szórás kinematikája

A folyamat a következő gráffal ábrázolható:



A hatáskeresztmetszet alakja is nagyon hasonló az  $e$ - $p$  szórásban látotthoz; (2.3)-ban  $e^2/q^2$  helyett  $G$ -t kell írunk, és egy 2-es faktort, mivel a neutrino spinjére nem kell átlagolni [7]:

$$d\sigma = \frac{1}{2} G \frac{1}{kp} L_{\mu\nu} W^{\mu\nu} \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3 2E'}. \quad (2.9)$$

Itt  $W_{\mu\nu}$ -ben a hadronok elektromágneses árama helyett a gyengeáram szerepel:

$$W_{\mu\nu}(p, q) = \int d^4x e^{iqx} \langle p | [J_\mu^+(x), J_\nu^-(0)] | p \rangle. \quad (2.10)$$

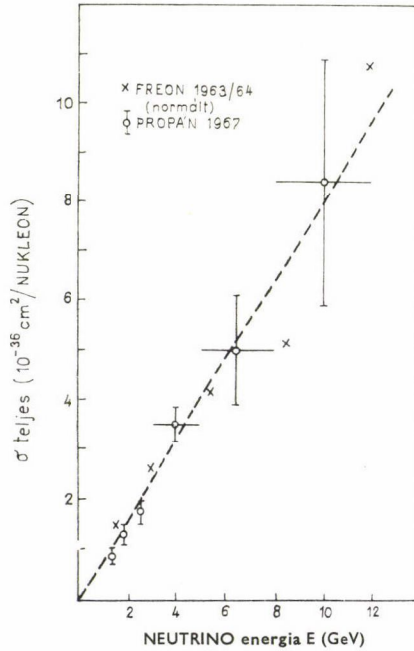
A gyengeáram  $V-A$  alakú, így a kommutátorban  $[V, A]$  típusú kifejezés is fog szerepelni. Emiatt a spinfüggetlen részben  $W_1$  és  $W_2$  mellett egy új struktúrájú tag is megjelenik:

$$W_{\mu\nu}^{(v, \bar{v})}(p, q) = \dots W_1 + \dots W_2 \mp 2\pi i \varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma} q^\rho p^\sigma W_3 + \\ + \text{spinfüggő tagok} + \text{nem megmaradó tagok} \quad (2.11)$$

(a felső előjel a neutrínó, az alsó az antineutrínó szórásra vonatkozik). ( $W_1$  és  $W_2$  együttthatója ugyanaz, mint (2.5)-ben. A gyenge áram nem marad meg, ezért (2.11)-ben olyan tagok is fellépnek, amelyek  $q^\mu$ -vel szorozva nem tűnnek el. Ezek azonban a szabad kvark-áramok esetén arányosak a kvark-tömeggel, így dimenziós okokból a fénykúp közelében kevésbé szingulárisak. Ennek következtében a Bjorken limeszben a megmaradó tagok mellett elhanyagolhatjuk őket.) A parton-modell szerint  $W_1$  és  $\nu W_2$  mellett  $\nu W_3$  is skálázik:

$$\nu W_3(q^2, \nu) \rightarrow F_3(\xi).$$

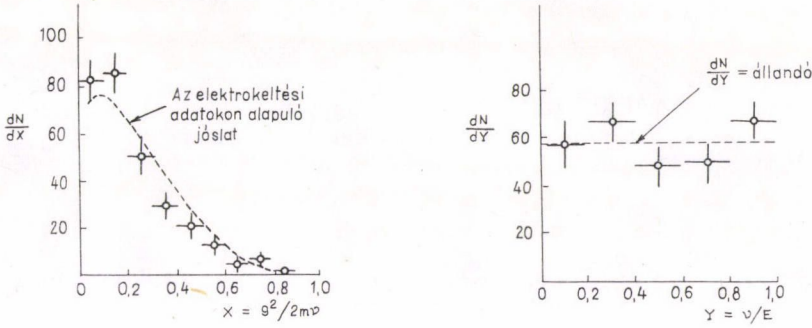
A kis hatáskeresztmetszet miatt nem sikerült még közvetlenül igazolni ezeket a jóslatokat. Ha viszont feltételezzük a parton-modell által jóslott skálaviselkedéseket, azt kapjuk, hogy a teljes hatáskeresztmetszet lineárisan nő a beeső energiával. A kísérleti eredmények alátámasztják ezt:



4. ábra. Neutrínó—nukleon szórás teljes hatáskeresztmetszete



A neutrínó események  $x$  és  $y$  eloszlása ( $x = x_B = -q^2/2M\nu$ ,  $y = \nu/E$ ) összhangban van a parton-moddal és az elektroprodukciónak adataiból számított parton-eloszlásfüggvényekkel [8]:



5. ábra A neutrínoszórás  $x$  és  $y$  eloszlása

A következőkben röviden összefoglaljuk, hogy mit mond a kvark parton-moddal az invariáns függvények skálaviselkedéséről és hogyan fejezhető ki a skálafüggvények a partonok eloszlásfüggvényeivel [7,13].

#### A parton-moddal és a skálafüggvények

A parton-moddal képleteit arra az esetre írjuk fel, amikor a partonok a Gell-Mann és Zweig [6] által javasolt kvarkokkal egyeznek meg.

Legyen  $u(x)$ ,  $d(x)$ ,  $s(x)$ ,  $\bar{u}(x)$ ,  $\bar{d}(x)$ ,  $\bar{s}(x)$  a megfelelő partonok eloszlásfüggvénye a protonban:  $u(x)dx$  annak a valószínűsége, hogy egy  $p$  impulzusú protonban találjunk egy  $xp$  és  $(x+dx)p$  közötti impulzussal rendelkező  $u$  kvarkot. Ha a partonok spinje  $1/2$ , akkor az  $ep$  szórásban mért két spinfüggetlen skálafüggvény,  $F_2(x) = \nu W_2$  és  $F_1(x) = 2MW_1$  között fennáll a Callan—Gross reláció [12], ami kísérletileg is jól teljesül:

$$F_1(x) = xF_2(x), \quad \left(x \equiv x_B = -\frac{q^2}{2M\nu}\right).$$

Elektron-proton szórásban:

$$F_1^{ep}(x) = \sum_{\alpha} Q_{\alpha}^2 f_{\alpha}(x) = \frac{4}{9}(u(x) + \bar{u}(x)) + \frac{1}{9}(d(x) + \bar{d}(x)) + \frac{1}{9}(s(x) + \bar{s}(x)). \quad (2.12)$$

Hasonlóan elektron-neutron szórásban:

$$F_1^{en}(x) = \frac{1}{9}(u + \bar{u}) + \frac{4}{9}(d + \bar{d}) + \frac{1}{9}(s + \bar{s}). \quad (2.13)$$

(Itt  $u$  — akárcsak az előző képletben — a protonban található  $u$  kvarkokat jelöli. A neutronban olyan valószínűséggel találunk  $d$  kvarkot, amekkorával  $u$  kvarkot a protonban.)

A spinfüggő skálafüggvények közül csak a számunkra érdekesebbiket, a  $\nu d + M\nu^2 g \rightarrow \gamma(x)$ -et írjuk fel. Ehhez tudnunk kell annak a valószínűségét, hogy egy + helicitású protonban talált ( $xp$  impulzusú) parton milyen valószínűséggel +, ill. - helicitású. Jelöljük ezeket  $u^\dagger(x)$ -szel, ill.  $u^\dagger(x)$ -szel. Természetesen

$$u(x) = u^\dagger(x) + u^\dagger(x), \quad \text{stb.}$$

$\gamma(x)$  ugyanúgy fejezhető ki a partonok eloszlásfüggvényeivel, mint  $F_1(x)$  (2.12 és 2.13), csak a  $(\dagger+\dagger)$  összeg helyett mindenütt a  $(\dagger-\dagger)$  különbség szerepel [11,13]:

$$\gamma^{ep}(x) = \frac{4}{9} (u^\dagger - u^\dagger) + \frac{4}{9} (\bar{u}^\dagger - \bar{u}^\dagger) + \dots \quad (2.14)$$

Tekintsük most a  $\nu p$ ,  $\nu n$ ,  $\bar{\nu} p$ ,  $\bar{\nu} n$  mélyen rugalmatlan szórások skálafüggvényeit. Elfogadva a kvarkok gyenge kölcsönhatásának „klasszikus” elméletét, a neutrínó csak a  $d$  és az  $\bar{u}$  kvarkkal hat kölcsön, míg az antineutrínó csak az  $u$  és a  $\bar{d}$  kvarkkal ( $\sin^2 \theta_c = 0,06 \sim 0$  közelítésben):

$$\nu + d \rightarrow \mu^- + u,$$

$$\nu + \bar{u} \rightarrow \mu^- + \bar{d},$$

$$\bar{\nu} + u \rightarrow \mu^+ + d,$$

$$\bar{\nu} + \bar{d} \rightarrow \mu^+ + u.$$

Így a neutrínó szórás csak a  $d$  és  $\bar{u}$ , az antineutrínó szórás csak az  $u$  és  $\bar{d}$  kvarkok eloszlásfüggvényeit méri. A megfelelő skálafüggvények [8, 9]:

$$F_1^{\nu p} = 2(\bar{u} + d)$$

$$F_1^{\nu n} = 2(\bar{d} + u)$$

$$F_1^{\bar{\nu} p} = 2(u + \bar{d}) = F_1^{\bar{\nu} n}$$

$$F_1^{\bar{\nu} n} = 2(d + \bar{u}) = F_1^{\nu p}$$

$$F_3^{\nu p} = 2(\bar{u} - d) \quad (2.15)$$

$$F_3^{\nu n} = 2(\bar{d} - u)$$

$$F_3^{\bar{\nu} p} = -2(u - \bar{d}) = F_3^{\bar{\nu} n}$$

$$F_3^{\bar{\nu} n} = -2(d - \bar{u}) = F_3^{\nu p}$$

A lepton-nukleon szórás skálafüggvényei sok független információt adhatnak a partonok eloszlásáról és így a parton-modell rengeteg kísérletileg ellenőrizhető következményre vezet [7, 13]. Mi a továbbiakban csak az ún. pozitivitási egyenlőtlenségeket fogjuk részletesen tárgyalni.



### III. Pozitivitási egyenlőtlenségek

Tekintsük a következő mátrixot:

$$M_{a'b',ab} = \int d^4x e^{iqx} \langle a' | [J^{b'}(x), J^b(0)] | a \rangle, \quad (3.1)$$

ahol  $a, a'$  tetszőleges állapotok,  $J^b$  és  $J^{b'}$  pedig lokális áramok. A kommutátorban szereplő operátorok közé egy teljes rendszert beszúrva azt kapjuk, hogy:

$$\begin{aligned} M_{a'b',ab} &= \sum_n \int d^4x e^{iqx} \langle a' | J^{b'}(x) | n \rangle \langle n | J^b(0) | a \rangle = \\ &= \sum_n (2\pi)^4 \delta(p_{a'} + q - p_n) \langle a' | J^{b'}(0) | n \rangle \langle n | J^b(0) | a \rangle. \end{aligned}$$

(Ha  $q_0$  elég nagy, a kommutátor második tagja a benne szereplő Dirac-delta miatt elhagyható.) Könnyen belátható, hogy az  $M$  mátrix pozitív szemidefinit, azaz

$$M_{a'b',ab} \bar{C}_{a'b'} C_{ab} \geq 0 \quad (3.2)$$

tetszőleges  $C_{ab}$  komplex mennyiségek esetén:

$$M_{a'b',ab} \bar{C}_{a'b'} C_{ab} = \sum_n (2\pi)^4 \delta(p_{a'} + q - p_n) \left| \sum_{ab} \langle n | J^b(0) | a \rangle C_{ab} \right|^2 \geq 0.$$

A mélyen rugalmatlan szórásban szereplő  $W_{\mu\nu}$  tenzorok (3.1) alakúak (2.4 és 2.10), így a pozitivitási egyenlőtlenségek megszorítják a bennük szereplő invariáns skálafüggvényeket. Általában az  $M$  mátrixnak nem minden eleme mérhető közvetlenül fizikai folyamatokban. Ha ezeket valamilyen szimmetriatulajdonság segítségével ki tudjuk fejezni mérhető mennyiségekkel, akkor nemtriviális és hasznos egyenlőtlenségeket kaphatunk.

*Bjorken* [15], majd *Nachtmann* [16] felhívták a figyelmet arra, hogy a pozitivitási feltételek alkalmasak a különböző parton-modellek ellenőrzésére.

Amíg további feltevéseket nem teszünk, a fentebb levezetett (3.2) egyenlőtlenség kinematikai jellegű. Ilyen egyenlőtlenségekkel sikerül összekapcsolni pl. a spinfüggő és spinfüggetlen invariáns függvényeket az elektron—proton szórásban [17,11].

Más típusú, dinamikai pozitivitási egyenlőtlenségeket vezetett le *Nachtmann* parton modellből [16], amelyben összekapcsolta a spinfüggetlen  $ep$ ,  $en$ ,  $vp$  és  $vn$  skálafüggvényeket. Érdekes, hogy ezek segítségével már a mostani kísérleti eredmények alapján kizárható az egész töltésű parton-modellek nagyrésze.

A *Nachtmann*-féle egyenlőtlenségek levezetéséről érdemes néhány szót ejteni. A parton-modellek általában csak azt az információt használják fel, hogy milyen valószínűséggel találhatunk egy adott típusú partont,  $u, d, s, \dots$  kvarkot a protonban. A kvark-partonok eloszlásfüggvényeire felírnak összegszabályokat, de ezek csak azt biztosítják, hogy proton additív kvantumszámái ( $B, Q, I_z, Y$ ) megfelelőek legyenek. Az viszont, hogy  $I_z = 1/2$  mellett a proton izospinje  $I = 1/2$  és nem  $I = 3/2, 5/2, \dots$  ennél erősebb állítás. Egy egyszerű példán fogjuk megmutatni, hogy hogyan építhető be az izospinre vonatkozó információ a partonmodellbe.

Iszopspinje, hogy egy  $a$  típusú nukleonban  $\alpha$  típusú kvarkot találunk ( $xp$  impulzussal, ezt azonban a rövidség kedvéért nem jelöljük,) formálisan így írható:

$$\langle a | q_\alpha^+ q_\alpha | a \rangle \quad (3.3)$$

ahol legyen  $|a\rangle = |p\rangle, |n\rangle$

$$\alpha = u, d.$$

Tekintsük most az

$$\langle a | q_\alpha^+ q_\beta | b \rangle \quad (3.4)$$

mátrixot, amelynek diagonális elemei a (3.3) valószínűségek. Hány független eleme van ennek a mátrixnak? A  $q_\beta | b \rangle$  állapot izospinje 0 és 1 lehet, így a mátrix 16 eleméből csak 2 független, pl. az

$$u = \langle p | q_u^+ q_u | p \rangle$$

és a

$$d = \langle p | q_d^+ q_d | p \rangle$$

valószínűségek. Az  $SU(2)$  invariancia miatt a (3.4) mátrix többi eleme kifejezhető ezekkel. A pozitivitási egyenlőtlenségekben a mátrix diagonális elemei majorálják a nem-diagonális elemeket, így végső soron — egy dinamikai szimmetria kihasználásával — a valószínűségekre kapunk egyenlőtlenségeket. A (3.4) mátrix pozitivitási feltétele például a meglepő

$$2u(x) - d(x) \geq 0$$

egyenlőtlenséget eredményezi [16].

Mi a következőkben olyan egyenlőtlenségeket fogunk levezetni, amelyek összekapcsolják a spinfüggetlen és spinfüggő  $eN$  valamint a  $\nu N$  szórás skálafüggvényeit a kvark parton modellben [14].

Itt jegyezzük meg, hogy ezek közül igazán csak a spinfüggetlen  $eN$  szórást ismerjük kísérletileg. A neutrínó kísérletek még folynak az NAL-ben ( $E_\nu \leq 200$  GeV) és hasonló energiájúakat terveznek a CERN-ben. Az események alacsony száma miatt itt nehézséget okoz a differenciális hatáskeresztmetszetek mérése és a skálafüggvények szeparálása. A spinfüggő  $eN$  szórás kísérletei a SLAC-ben még kezdeti stádiumban vannak.

Ha a pozitivitási egyenlőtlenségeket a Bjorken limeszben, tehát a parton-modell határesetében akarjuk kiértékelni, akkor a hadronok elektromágneses ill. gyenge áramát úgy tekinthetjük, mintha az egyszerűen a szabad kvark-terekből épülne fel. Ekkor kiszámíthatjuk az áram—áram kommutátorokat, ami nagyon leegyszerűsíti a (3.1) mátrix struktúráját.

A szabad kvark áramok kommutátorai az  $(x-y)^2 = z^2 \sim 0$  fénykúp közelében (a Bjorken limeszért a fénykúp körüli szingularitások a felelősek) a következőképpen néznek ki:

$$\begin{aligned} [J_\mu^i(x), J_\nu^j(y)] &\cong [J_{5\mu}^i(x), J_{5\nu}^j(y)] \cong \frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial z_\sigma} [\varepsilon(z_0) d(z^2)] \times \\ &\times \{if_{ijk}[s_{\mu\nu\varrho\sigma} S_k^{\varrho}(x, y) - i\varepsilon_{\mu\nu\varrho\sigma} A_k^{5\varrho}(x, y)] + d_{ijk}[s_{\mu\nu\varrho\sigma} A_k^{\varrho}(x, y) - i\varepsilon_{\mu\nu\varrho\sigma} S_k^{5\varrho}(x, y)]\} \end{aligned} \quad (3.5)$$

és hasonló kifejezés érvényes a

$$J_{5\mu}^i(x), J_\nu^j(y)] \cong [J_\mu^i(x), J_{5\nu}^j(y)]$$

kommutátorokra is az  $S \leftrightarrow S^5, A \leftrightarrow A^5$  cserével.



A fenti képletekben

$$J_\mu^i(x) = \bar{\psi}(x) \gamma_\mu \frac{1}{2} \lambda^i \psi(x),$$

$$S_\mu^i(x, y) = \frac{1}{2} \left( \bar{\psi}(x) \gamma_\mu \frac{1}{2} \lambda^i \psi(y) + \bar{\psi}(y) \gamma_\mu \frac{1}{2} \lambda^i \psi(x) \right),$$

$$A_\mu^i(x, y) = \frac{1}{2} \left( \bar{\psi}(x) \gamma_\mu \frac{1}{2} \lambda^i \psi(y) - \bar{\psi}(y) \gamma_\mu \frac{1}{2} \lambda^i \psi(x) \right),$$

$$J_{5\mu}^i(x) = \bar{\psi}(x) \gamma_5 \gamma_\mu \frac{1}{2} \lambda^i \psi(x), \dots$$

$$S_{\mu\nu q\sigma} = -g_{\mu\nu} g_{q\sigma} + g_{\mu\sigma} g_{\nu q} + g_{\mu q} g_{\nu\sigma},$$

$$i, j = 0, 1, 2, \dots, 8,$$

$$z = x - y.$$

Fritsch és Gell-Mann [20] hipotézise szerint a hadronáramok kommutátora a fénykúp közelében olyan szerkezetű, mint a szabad kvark áramok kommutátora. A mélyen rugalmatlan lepton—hadron szórásra alkalmazva ez a parton-hipotézissel ekvivalens. Az  $S_\mu^i(x, y)$ , ... bilokális operátorok diagonális mátrixelemei szoros kapcsolatban vannak a skálafüggvényekkel — azok Fourier transzformáltjai [20]. A skálafüggvények kifejezése a bilokális operátorok segítségével és az egyenlőtlenségek levezetése [14] hosszadalmas és kevésbé tanulságos, ezért csak a gondolatmenetet közöljük.

Tekintsük a (3.1) mátrixot, ahol  $|a\rangle$  legyen valamilyen nukleon állapot:

$$|a\rangle = |p(p, \alpha)\rangle, |p(p, -\alpha)\rangle, |n(p, \alpha)\rangle, |n(p, -\alpha)\rangle$$

$[(p, \alpha)$  a nukleon impulzusa és spinje], a  $J_b$  áram pedig az SU(3) oktet és szinglet áramok:

$$J^b = J_\mu^b(x), J_{5\mu}^b(x) \quad i = 0, 1, 2, \dots, 8.$$

A (3.5) struktúra felhasználásával kapott mátrix nemdiagonális elemeit SU(2) invariancia felhasználásával kifejezhetjük a diagonális mátrixelemekkel, tehát a különböző skálafüggvényekkel [akárcsak (3.4) esetében]. Ezt az óriási mátrixot szerencsére külön lehet diagonalizálni a Lorentz- és az SU(3) indexekben, így végül lineáris egyenlőtlenségeket kapunk a skálafüggvényekre. Ezekből, mint érdekteleneket, a spinfüggő neutrínó skálafüggvényeket kiküszöbölve, a következő 8 egyenlőtlenséget kapjuk:

$$\text{I. } F_1^{\gamma p} + F_1^{\gamma n} \equiv \frac{18}{5} (F_1^{ep} + F_1^{en}).$$

$$\text{II. } |2F_3^{\gamma n} - F_3^{\gamma p}| \leq 2F_1^{\gamma n} - F_1^{\gamma p}$$

$$\text{III. } |F_3^{\gamma p}| \leq F_1^{\gamma p}$$

$$\text{IV. } |4\gamma^{ep} - \gamma^{en}| \leq 4F_1^{ep} - F_1^{en} \quad (3.6)$$

$$\text{V. } |4\gamma^{en} - \gamma^{ep}| \leq 4F_1^{ep} - F_1^{en}$$

$$\text{VI. } |\gamma^{ep} - \gamma^{en}| \leq \frac{1}{6} F_1^{en}$$

$$\text{VII. } |3\gamma^{ep} - 2\gamma^{en}| \leq \frac{1}{2} (F_1^{ep} + F_1^{en}) + \frac{5}{36} (2F_1^{en} - F_1^{ep} - F_3^{en} + 2F_3^{ep})$$

$$\text{VIII. } |3\gamma^{en} - 2\gamma^{ep}| \leq \frac{1}{2} (F_1^{ep} + F_1^{en}) + \frac{5}{36} (2F_1^{en} - F_1^{ep} + F_3^{en} - 2F_3^{ep}).$$

Az egyenlőtlenségek levezetésénél csak azt használtuk ki, hogy a proton és a neutron SU(2) dubletként épül fel a kvark-partonokból. SU(3) invarianciát feltételezve némileg erősebb egyenlőtlenségekhez jutunk.

Az első három egyenlőtlenséget, amely nem tartalmaz spinfüggő skálafüggvényt, már *Nachtmann* megkapta [16].

A IV. és V. egyenlőtlenség felhasználásával korlátot nyerhetünk a protonon és neutronon történő spin aszimmetriájára. Az asszimmetria struktúrafüggvényekkel kifejezve a következő:

$$A = \frac{d\sigma^{\uparrow} - d\sigma^{\downarrow}}{d\sigma^{\uparrow} + d\sigma^{\downarrow}} = \frac{(E + E' \cos \vartheta)d + (E - E' \cos \vartheta)(E + E')Mg}{2MW_1 + MW_2 \operatorname{ctg}^2 \frac{1}{2} \vartheta}. \quad (3.7)$$

Itt  $E$  és  $E'$  az elektron energiája a kezdeti, ill. a végállapotban a laborrendszerből mérve,  $\vartheta$  az elektron szórási szöge,  $d\sigma^{\uparrow}$  ( $d\sigma^{\downarrow}$ ) a hatáskeresztmetszet abban az esetben, amikor a bejövő elektron és a nukleon spinje antiparalel (paralel), és az elektron impulzusának irányába mutat. Ha  $E \rightarrow \infty$ ,  $\vartheta$  és  $\xi = -q^2/2Mv$  rögzített, akkor

$$A \approx \frac{\gamma(\xi)}{F_1(\xi)}. \quad (3.8)$$

A IV. és V. egyenlőtlenségeket alkalmazva a protonon és a neutronon mért aszimmetriák különbségére a következő korlátot kapjuk:

$$\frac{1}{2} |A^p - A^n| \leq \frac{(4F_1^{ep} - F_1^{en})(4F_1^{en} - F_1^{ep})}{15F_1^{ep}F_1^{en}} \leq \frac{3}{5}. \quad (3.9)$$

Az összegre nem kapunk dinamikai megszorítást:

$$\frac{1}{2} |A^p + A^n| \leq 1. \quad (3.10)$$

Nagy, de véges  $E$  esetén a skálázási tartományban vagyunk, de (3.8) kinematikai szorzótényezővel módosul. Írjuk át (3.7)-et célszerűbb alakra:

$$A = \frac{(E - E' \cos \vartheta)(E + E')(vd + v^2 Mg) - 2EE'(1 - \cos \vartheta)vd}{2MW_1 \left( E^2 + E'^2 + 2EE'R \cos^2 \frac{\vartheta}{2} + 2EE' \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \right)} \left( 1 + \frac{4EE' \sin^2 \frac{\vartheta}{2}}{(E - E')^2} \right).$$



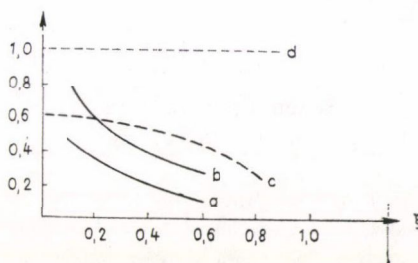
Ha a SLAC-kísérlet jellemző adataiként  $E=16$  GeV-et és  $\vartheta=9^\circ$ -ot helyettesítünk be, felhasználva, hogy kísérletileg  $R \lesssim 0,2$  (lásd (2.8)-at), az  $R$ -rel vagy  $\sin^2 \frac{\vartheta}{2}$ -vel arányos tagokat elhagyhatjuk. Felhasználva a

$$|vd| \equiv 2MW_1 v \sqrt{\frac{R}{Q^2}}$$

kinematikai egyenlőtlenséget [11, 17], azt kapjuk, hogy

$$A \approx \frac{\gamma(\xi)}{F_1(\xi)} \cdot \frac{E^2 - E'^2}{E^2 + E'^2}, \quad (3.11)$$

és hasonló korrekciós tényező jelenik meg (3.9)-ben és (3.10)-ben is (lásd a 6. ábrát).



6. ábra. Felső korlátok a spin-asszimmetriára

$ep$  és  $en$  szórásban: (a)  $\frac{1}{2} |A^p - A^n|$ ,

(b)  $\frac{1}{2} |A^p + A^n|$ ,  $E=16$  GeV és  $\vartheta=9^\circ$  mellett;

(c) és (d) ugyanezek a mennyiségek  $E \rightarrow \infty$ ,  $\vartheta$  rögzített esetben.

Érdemes az egyenlőtlenségeket a kvarkok eloszlás-függvényeinek segítségével is kifejezni. A rövidség kedvéért legyen:

$$u' = u^\dagger - u^\dagger, \quad u = u^\dagger + u^\dagger.$$

Ekkor a megfelelő egyenlőtlenségek:

I.  $s + \bar{s} \geq 0$

II.  $2u - d \geq 0$

$2\bar{d} - \bar{u} \geq 0$

III.  $\bar{u} \geq 0$

$d \geq 0$

IV.  $|5(u' + \bar{u}') + (s' + \bar{s}')| \leq 5(u + \bar{u}) + (s + \bar{s})$

V.  $|5(d' + \bar{d}') + (s' + \bar{s}')| \leq 5(d + \bar{d}) + (s + \bar{s})$

(3.12)

- VI.  $|u' + \bar{u}' - d' - \bar{d}'| \leq u + \bar{d}$   
 VII.  $|10(u' + \bar{u}') - 5(d' + \bar{d}') + (s' + \bar{s}')| \leq 5(2u + \bar{u} - d + \bar{d}) + (s + \bar{s})$   
 VIII.  $|10(d' + \bar{d}') - 5(u' + \bar{u}') + (s' + \bar{s}')| \leq 5(u - \bar{u} + d + 2\bar{d}) + (s + \bar{s}).$

Ezek közül néhány rögtön következik az eloszlásfüggvények pozitivitásából, nem triviális a II. és az utolsó három egyenlőtlenség. Az utóbbiak levezetéséhez azt is ki kellett használnunk, hogy a proton izospinje  $\frac{1}{2}$ .

A (3.6/VI) egyenlőtlenséget felhasználhatjuk a Bjorken összesszabály [21] kiértékelésére:

$$\int_0^1 (\gamma^{ep}(\xi) - \gamma^{en}(\xi)) d\xi = \frac{1}{3} \frac{G_A}{G_V}, \quad (3.13)$$

ahol  $G_A$  és  $G_V$  a hadronok gyenge vektor és axiálvektor áramának csatolási állandója:

$$\frac{G_A}{G_V} \approx 1,2.$$

Feltehetjük, hogy  $\xi \leq 0,2$  esetén a partonok (a „kvark-tenger” [47]) már polarizáltak, nem emlékeznek a proton spinjére. Így

$$1,2 \approx \frac{G_A}{G_V} \approx 3 \int_{0,2}^1 (\gamma^{ep} - \gamma^{en}) d\xi \leq \frac{1}{2} \int_{0,2}^1 F_1^{vp} d\xi = \int_{0,2}^1 (u + \bar{d}) d\xi.$$

Az elektro- és neutrínó-produkciós kísérletekből tudjuk, hogy  $\xi \leq 0,2$  esetén a proton leírásához elegendő a három valencia-kvark, így a jobb oldal értéke kb. 2 (az  $u$  kvarkok száma a protonban) az egyenlőtlenség tehát teljesül. A két oldalon lényegében az  $u^\dagger - u^\dagger$  és az  $u^\dagger + u^\dagger$  kifejezés áll. Így megbecsülhetjük a partonok polarizációját:

$$u^\dagger - u^\dagger \sim \frac{1}{2} (u^\dagger + u^\dagger)$$

vagy

$$\gamma^{ep} \sim \frac{1}{2} F_1^{ep}.$$

Ha sikerül kimérni a megfelelő skálafüggvényeket, a (3.6) egyenlőtlenségek teljesülése erősen alátámasztaná a Gell-Mann, Zweig kvark-hipotézist. Mint *Feynman* megjegyzi [13], egész töltésű kvarkok esetén az elektroproduktions adatok nagyobbak lennének, míg a neutrínó adatok nem változnának. Egy ilyen parton modellben az utolsó három egyenlőtlenség sérülhet.

#### IV. A mélyen rugalmatlan ütközésekben keletkezett hadronokról

A partonok tulajdonságairól többet is megtudhatunk, ha a mélyen rugalmatlan lepton—nukleon szórásban nemcsak a szóródott leptont detektáljuk, hanem a hadron végállapotokat is. Olyan reakciókat fogunk vizsgálni, amelyekben a kimenő hadronok közül csak az egyiket mérjük:

$$e + p \rightarrow e + h + \dots$$



A parton-modell nyelvén feltéve a kérdést: hogyan keletkezik a meglökött partonból a hadronok sokasága?

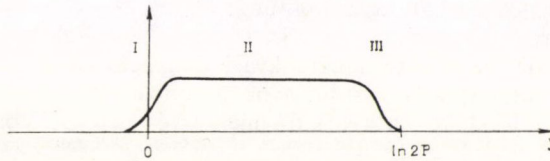
Az  $x = p_{\text{parton}}/P$  változó helyett néha célszerűbb a hadron—hadron szórásban már régebben bevezetett rapiditás-változót használni. Egy  $p$  impulzusú és  $E = \sqrt{m^2 + p^2}$  energiájú részecske rapiditása:

$$y = \frac{1}{2} \ln \frac{E + p_z}{E - p_z}. \quad (4.1)$$

A rapiditás-változónak az az előnye, hogy  $z$ -tengely irányú Lorentz transzformáció esetén a részecskék rapiditásához egy konstans adódik hozzá, így két részecske relatív rapiditása,  $(y_1 - y_2)$   $z$ -boost invariáns. Ha  $p_z \gg P_x, P_y, m$  akkor

$$y \approx \ln 2p_z/m. \quad (4.2)$$

Tekintsünk egy nagy  $P$  impulzussal a  $z$  irányban mozgó protont. Az őt alkotó partonok eloszlásfüggvénye a rapiditás-változóban a következőképpen néz ki:

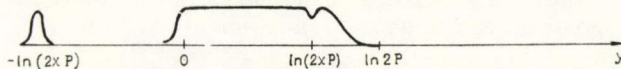


ahol az egyes rapiditástartományok:

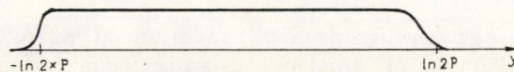
- I. ún. „wee” partonok
  - II. plató
  - III. az adott hadronra jellemző tartomány.
- } univerzálisak

Az eloszlásfüggvények kísérletileg észlelt  $\frac{dx}{x}$  viselkedése ezen az ábrán egy hosszú platóként jelentkezik. Részben a kísérleti eredmények, részben térelméleti modellek alapján *Feynman* feltételezte [13], hogy a plató univerzális (minden részecskére egyforma) és semleges (parton és antiparton egyforma valószínűséggel fordul elő benne).

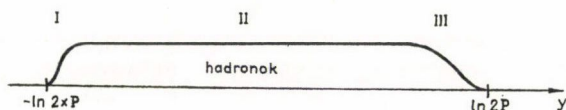
A mélyen rugalmatlan  $e-p$  szóráshoz (a Breit rendszerben) a  $-2xP = -\sqrt{Q^2}$  impulzusú virtuális foton kilök a protonból egy  $xP$  impulzusú partont, amelynek impulzusa közvetlenül az ütközés után  $-xP$  lesz. Így a partonok eloszlásfüggvénye közvetlen ütközés után:



A kiűtött partont nem látjuk külön megjelenni, így joggal feltételezhető [13], hogy ugyanúgy, ahogyan a még meg nem zavart hadronban a partonok valamilyen kaszkádszerű kölcsönhatás útján létrehozzák a platót — a megzavart hadronban is megjelenik a két különálló tartományt összekötő plató:



Ha feltételezzük, hogy csak a rapiditásban közeli partonok vannak egymással kölcsönhatásban (ez összefügg az univerzális plató hipotézisével), akkor a kezdeti hadron és a meglökött parton fajtájától csak az eloszlás megfelelő részei függnének (de ezek is függetlenek  $P$  és  $x$  értékétől). Az ütközés után keletkezett állapot tömege azonban  $W = \sqrt{2Mv + q^2 + M^2} \gg M$ , így az állapot instabil lesz. Ha ismét csak a rapiditásban közeli partonok kondenzálódnak hadronokká, akkor a hadronok eloszlásfüggvénye hasonló lesz az előzőhöz:



Így azt kapjuk, hogy az egyes rapiditás-tartományokban detektált hadronok eloszlása a következőképpen jellemezhető:

I. függ az észlelt hadron és a meglökött kvark fajtájától, impulzusaik arányától (relatív rapiditásuktól), de nem függ az eredeti hadron fajtájától;

II. csak az észlelt hadron fajtájától függ;

III. függ az eredeti hadron, a meglökött kvark és az észlelt hadron fajtájától és relatív rapiditásuktól; Az I. tartományt a kvark fragmentációs tartományának nevezzük; ez folytonosan átmegy a II. tartományba, az univerzális platóba.

Tehát a hadron produkció a kvark fragmentációs tartományban leírható néhány

$$D_{\alpha}^i(z)$$

eloszlásfüggvénnyel, ahol  $\alpha$  a parton,  $i$  az észlelt hadron fajtáját jelöli, és  $P_{\text{hadron}} = zP_{\text{parton}}$ . Az univerzális plató hipotézise azt jelenti, hogy kis  $z$  értékekre

$$D_{\alpha}^i(z) \sim \frac{C_i}{z},$$

$$(dy = d \ln z = dz/z). \quad (4.3)$$

A  $D_{\alpha}^i$  függvények nem mind függetlenek, szimmetria-relációk kapcsolják össze őket.

A parton-fragmentációs hipotézis sok érdekes és kísérletileg is ellenőrizhető következménnyel jár. Tekintsük az  $e+p \rightarrow e+h^i+\dots$  folyamat hatáskeresztmetszetét. A folyamat két részből áll: először a virtuális foton  $Q_{\alpha}^2 f_{\alpha}(x)$  valószínűséggel meglöki az  $\alpha$  típusú,  $xP$  impulzusú kvarkot,  $-xp$  impulzust kölcsönözve neki, majd ez  $D_{\alpha}^i(z)$  valószínűséggel eredményez  $i$  típusú,  $-zxp$  impulzusú hadront.

Így

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \sigma^i}{dx dz} &\propto N^i(x, z) = \sum_{\alpha} Q_{\alpha}^2 f_{\alpha}(x) D_{\alpha}^i(z) = \\ &= \frac{4}{9} u(x) D_u^i(z) + \frac{4}{9} \bar{u}(x) D_{\bar{u}}^i(z) + \frac{1}{9} d(x) D_d^i(z) + \dots \end{aligned} \quad (4.4)$$

Felhasználva a  $D_{\alpha}^i$  függvényekre az  $SU(2)$  invarianciát, az  $N^i(x, z)$  függvényekből olyan kombinációk képezhetők, amelyek  $x$  és  $z$  függése faktorizálódik, így különösen



alkalmas a kísérlettel való összehasonlításra [13, 22, 32]. Így például könnyen levezethetők a következő érdekes összefüggések, amelyek csak az elektroprodukción adatokat használják [32]:

$$N_{\pi^+}^{ep} - N_{\pi^-}^{ep} = \left[ \frac{4}{9} (u - \bar{u}) - \frac{1}{9} (d - \bar{d}) \right] (D^+ - D^-),$$

$$N_{\pi^+}^{en} - N_{\pi^-}^{en} = \left[ \frac{4}{9} (d - \bar{d}) - \frac{1}{9} (u - \bar{u}) \right] (D^+ - D^-),$$

$$(D^+ \equiv D_u^{\pi^+}, D^- \equiv D_u^{\pi^-}).$$

Az egyenlőségek  $x$  szerinti integrálja egyszerűen elvégezhető, mivel

$$\int_0^1 (u - \bar{u}) dx = 2, \quad \int_0^1 (d - \bar{d}) dx = 1.$$

Így

$$\int_0^1 dx (N_{\pi^+}^{ep} - N_{\pi^-}^{ep}) = \frac{7}{9} (D^+ - D^-),$$

$$\int_0^1 dx (N_{\pi^+}^{en} - N_{\pi^-}^{en}) = \frac{2}{9} (D^+ - D^-).$$

Végül a  $z$  szerinti integrálás is elvégezhető, mivel (lásd 4.5-öt):

$$\int_0^1 dz (D^+ - D^-) \approx \frac{1}{2},$$

így

$$\int dx dz (N_{\pi^+}^{ep} - N_{\pi^-}^{ep}) = \frac{7}{18},$$

$$\int dx dz (N_{\pi^+}^{en} - N_{\pi^-}^{en}) = \frac{2}{18}.$$

Még egyszerűbb faktorizálódó kombinációk bevezetése neutrínó produkció esetén.

Érdemes megemlíteni, hogy a  $D_\alpha^i(z)$  függvények közvetlen információval szolgálhatnak a partonok kvantumszámaira vonatkozóan. *Feynman* azt állította [13], hogy a parton-fragmentációs tartományból származó hadronok átlagtöltése megadja a parton töltését:

$$Q_\alpha = \int_0^1 dz \sum_i Q_i D_\alpha^i(z) \quad (4.5)$$

(itt  $Q$  bármilyen additív kvantumszámot jelenthet: bariontöltés, izotöltés stb.). *Farrar* és *Rosner* [26] megmutatták, hogy a töltésre és a barionszámra ez csak SU(3) invariáns parton-parton kölcsönhatás esetén igaz. Így (4.5) valószínűleg csak a kvar-

kok izotöltésére nézve tekinthető helyesnek. Sajnos, ez a legkevésbé érdekes, mert itt nem lép fel a kvark-töltésekre jellemző  $\frac{1}{3}$ . Az  $e+p \rightarrow e+h+\dots$  reakcióban azt várjuk, hogy a parton fragmentációs tartományban több  $\pi^+$  keletkezik, min  $\pi^-$ , főleg az  $x \sim 1$  körüli eseményekben, amikor a protonban nagy valószínűséggel  $u$  kvarkot találunk (erre utal az, hogy  $F_1^{en}/F_1^{ep} \rightarrow \frac{1}{4}$ , ha  $x \rightarrow 1$ ). A kísérleti eredmények összhangban vannak a fentiekkel [24].

### V. A kvark fragmentáció kaszkád modellje

A továbbiakban egy speciális dinamikai feltételezés segítségével összefüggéseket vezetünk le a fragmentációs függvényekre. Matematikailag a legegyszerűbb az a mechanizmus, amikor a meglökött kvark-parton egyenként sugározza ki a hadronokat. Különböző megmaradási törvények szempontjából több szerző tárgyalta ezt a modellt [13, 26, 27]. Érdemes megvizsgálni a kaszkád modell egyéb kísérleti következményeit. A továbbiakban a végállapotban észlelt hadronok (pionok) rapiditás eloszlását fogjuk tárgyalni a kaszkád modell alapján [25].

A következő egyszerűsítő feltevéseket tesszük:

a) A meglökött kvark lépésenként veszti el impulzusát, úgy, hogy mindannyiszor egy-egy piont sugároz ki.

b) Valószínűségi amplitúdók helyett valószínűségeket használhatunk. Mint már Cahn és Colglazier [27] megjegyzik, ez igaz, ha a pionok rapiditás szerinti sorrendje megegyezik az emisszió sorrendjével. (Erre a kérdésre a későbbiekben visszatérünk.)

c) A fragmentációs függvényekre vonatkozó skálatörvény minden lépésben igaz, vagyis egy  $\alpha$  típusú parton ( $\alpha = u, d, \bar{u}, \bar{d}$ ), amely  $p$  impulzussal rendelkezik, elsőként egy  $i$  típusú ( $i = \pi^+, \pi^-, \pi^0$ ) és  $zp$  impulzusú hadront  $d_\alpha^i(z)$  valószínűséggel emittál. (A kaon, ... keltést elhanyagoljuk, és a pion transzverzális impulzusától is eltekinünk.)

Az SU(2) invarianciából következik, hogy ezek a függvények azonos alakúak:

$$d_\alpha^i(z) = C_\alpha^i d(z), \quad (5.1)$$

ahol

$$\int_0^1 d(z) dz = 1, \quad C_u^{\pi^+} = C_d^{\pi^-} = C_{\bar{u}}^{\pi^-} = C_{\bar{d}}^{\pi^+} = \frac{2}{3} \quad \text{és} \quad C_u^{\pi^0} = C_d^{\pi^0} = C_{\bar{u}}^{\pi^0} = C_{\bar{d}}^{\pi^0} = \frac{1}{3}.$$

Tegyük fel, hogy a virtuális foton egy  $u$  kvarkot lök meg. Ekkor a kvark  $\frac{2}{3}$  valószínűséggel egy  $\pi^+$ -t sugároz ki és  $d$  kvark lesz belőle, ill.  $\frac{1}{3}$  valószínűséggel  $\pi^0$ -t sugároz ki és megmarad  $u$  állapotban. Ha  $a_n, b_n$ -nel jelöljük annak a valószínűségét, hogy az  $n$ -edik pion kisugárzása után a kvark  $u$  vagy  $d$  állapotban van, a következő összefüggéseket kapjuk:

$$a_{n+1} = \frac{1}{3} a_n + \frac{2}{3} b_n,$$

$$b_{n+1} = \frac{2}{3} a_n + \frac{1}{3} b_n.$$



Ezek megoldásai (ha  $a_0=1$ ,  $b_0=0$ ):

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{2} \left[ 1 + \left( -\frac{1}{3} \right)^n \right], \\ b_n &= \frac{1}{2} \left[ 1 - \left( -\frac{1}{3} \right)^n \right]. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Annak a valószínűsége, hogy az  $(n+1)$ -edik lépésben emittált pion  $\pi^+$ ,  $\pi^-$ ,  $\pi^0$ :  $\frac{2}{3}a_n$ ,  $\frac{2}{3}b_n$ , ill.  $\frac{1}{3}(a_n+b_n) = \frac{1}{3}$ . (5.2)-ből látszik, hogy a kaszkád-bomló kvark által elvitt  $I_z$  izotöltés aszimptotikusan ( $n \rightarrow \infty$  esetén) zérus. Következésképpen a kvark izotöltése megmarad a kvark fragmentációs tartományában [13]. Az is látható, hogy az izotöltést lényegében két-három pion viszi el — ekkor  $(-\frac{1}{3})^n$  már elég kicsi. Ugyanakkor a kvark által elvitt elektromos töltés nem tűnik el  $n \rightarrow \infty$  esetén:

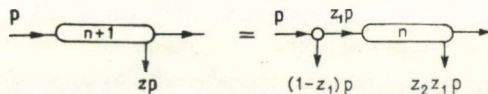
$$Q_\infty = \frac{1}{2} \left( \frac{2}{3} \right) + \frac{1}{2} \left( -\frac{1}{3} \right) = \frac{1}{6}.$$

Ez természetes is, hiszen a  $K$ -mezon keltést (az  $s$  kvarkokat) elhanyagoltuk [13, 26].

Vizsgáljuk meg a végállapotban keletkezett pionok impulzus-eloszlását. Mivel a  $d(z)$  függvény minden pionra ugyanaz, ezt a pionok kvantumszámától függetlenül megtehetjük. Jelöljük  $D_n(z)$ -vel annak a valószínűségét, hogy az  $(n+1)$ -edik impulzusa  $zP$ . Nyilvánvalóan

$$D_0(z) = d(z). \quad (5.3)$$

A  $D_n(z)$  függvényekre egy rekurziós összefüggést írhatunk fel a következő ábra alapján



$$D_{n+1}(z) = \int dz_1 dz_2 d(1-z_1) D_n(z_2) \delta(z - z_1 z_2), \quad (5.4)$$

vagy

$$D_{n+1}(z) = \int_z^1 \frac{dz_1}{z_1} d(1-z_1) D_n\left(\frac{z}{z_1}\right). \quad (5.5)$$

Könnyen belátható, hogy (5.5) eleget tesz az

$$\int_0^1 D_n(z) dz = 1 \quad (5.6)$$

normálási feltételnek.

Annak a valószínűsége, hogy találunk egy  $zP$  impulzussal rendelkező piont:

$$D(z) = \sum_{n=0}^{\infty} D_n(z). \quad (5.7)$$

Adott fajtájú pionokra a megfelelő valószínűségek:

$$\begin{aligned} D_u^{\pi^+} &\equiv D^+ = \frac{2}{3} \sum_n a_n D_n(z), \\ D_u^{\pi^-} &\equiv D^- = \frac{2}{3} \sum_n b_n D_n(z), \end{aligned} \quad (5.8)$$

$$D_u^{\pi^0} \equiv D^0 = \frac{1}{3} \sum_n (a_n + b_n) D_n(z) = \frac{1}{3} D(z).$$

(5.2)-ből és (5.6)-ból kapjuk az

$$\int_0^1 [D^+(z) - D^-(z)] dz = \frac{1}{2} \quad (5.9)$$

összefüggést. Ez az összegszabály azt fejezi ki, hogy a kvark fregmentációs tartományából származó hadronok átlagos izotöltése megegyezik az  $u$  kvark  $I_z = +\frac{1}{2}$  izotöltésével [13].

(5.5)-öt  $n$  szerint összegezve egy inhomogén integrálegenletet kapunk:

$$D(z) = d(z) + \int_z^1 \frac{dz_1}{z_1} d(1-z_1) D\left(\frac{z}{z_1}\right). \quad (5.10)$$

(5.6) miatt  $D(z)$  integrálja divergens, így  $z=0$  körül szingulárisnak kell lennie. Feltevése, hogy  $D(z)$  legszingulárisabb tagja hatványszerű, (5.10)-ből könnyen levezethető, hogy

$$D(z) \sim \frac{C}{z},$$

azaz a rapiditásban egy plató van. A plató magasságát (5.10)-ből közvetlenül is megkaphatjuk, ha a  $d(z)$  függvény ismert. Itt csak az eredményt közöljük:

$$\frac{1}{C} = \int_0^1 dz d(z) \ln \frac{1}{1-z}. \quad (5.11)$$

Ez az összefüggés egyszerűen interpretálható. A jobb oldalon álló kifejezés két pion átlagos rapiditás-különbsége (az impulzusaik  $z_1 p$  és  $z_2(1-z_1)p$ ):

$$\langle \Delta y \rangle = \int dz_1 dz_2 d(z_1) d(z_2) \ln \frac{z_1}{z_2(1-z_1)} = \int dz d(z) \ln \frac{1}{1-z},$$

következésképpen

$$C = \frac{1}{\langle \Delta y \rangle}.$$

Ez közvetlen fizikai megfontolásból is következik: a multiplicitás  $= CY = Y/\langle \Delta y \rangle$ , ahol  $Y$  a plató hossza. (5.10)-et  $z$ -vel szorozva és integrálva azt kapjuk, hogy

$$\int_0^1 dz \cdot z D(z) = 1. \quad (5.12)$$



Ez azt jelenti, hogy a meglökött kvark teljes impulzusát a fragmentációs tartományban keletkezett hadronok viszik el. (5.2) és (5.5) alapján a

$$\Delta(z) \equiv D^+(z) - D^-(z)$$

függvényre a következő integrálegyenletet írhatjuk fel:

$$\Delta(z) = \frac{2}{3} d(z) - \frac{1}{3} \int_0^1 \frac{dz_1}{z_1} d(1-z_1) \Delta\left(\frac{z}{z_1}\right). \quad (5.13)$$

Következésképpen van két integrálegyenletünk — (5.10) és (5.13) — amelyekben csak a  $d(z)$  függvény ismeretlen;  $D(z)$  és  $\Delta(z)$  a kísérletekből meghatározható. Ez lehetőséget nyújt arra, hogy feltevéseinket kísérletileg ellenőrizzük.

Az (5.13) integrálegyenletnek az az előnye (5.10)-zel szemben, hogy a  $\Delta(z)$  függvény nem szinguláris  $z=0$ -ban (a plató semleges), és tudjuk, hogy integrálja  $\frac{1}{2}$  [l. (5.9)-et; ez az eredmény közvetlenül (5.13)-ból is megkapható]. A jelenlegi kísérleti adatok még csak a  $0,2 < z < 0,7$  tartományban mutatnak skálaviselkedést. Az (5.9) összszabály segítségével azonban  $\Delta(z)$ -t kis  $z$  értékekre is elfolytathatjuk valamilyen módon. Ezután (5.13)-ból kiszámítjuk  $d(z)$ -t, majd (5.10)-ből  $D(z)$ -t, vagy (5.11)-ből a plató magasságát.

Célszerű (5.10)-et átírni a véges  $H(z) \equiv zD(z)$  függvényre:

$$H(z) = zd(z) + \int_z^1 dz_1 d(1-z_1) H\left(\frac{z}{z_1}\right), \quad (5.10')$$

$$H(0) = C.$$

Ha  $d(1)=0$ , amint azt a kísérleti adatok sugallják, és  $d(0)$  véges, akkor (5.10')-ből meghatározhatjuk  $H'(0)$ -t:

$$H'(0) = d(0) \cdot \left[ 1 - \int_0^1 \frac{dz}{z} d(1-z) \right]^{-1}.$$

Ez az érték negatív, ami azt jelenti, hogy a kvark-fragmentációs függvény (a rapiditás változó függvényeként) a plató szélén csökken (amikor  $y \rightarrow y_{\max}$ ), egyezésben a kísérlettel.

Speciális  $d(z)$  függvények esetén az integrálegyenletek analitikusan is megoldhatók. Ha

$$d(z) = (m+1)(1-z)^m, \quad m > -1$$

akkor

$$D(z) = \frac{d(z)}{z} \quad (5.14)$$

és

$$\Delta(z) = \frac{2}{3} d(z) F\left(1, -\frac{1}{3}(m+1); m+1; 1-z\right),$$

ahol  $F$  a hipergeometrikus függvény. Egész  $m$  értékekre  $\Delta(z)$  véges alakba írható.

Megemlítjük még, hogy az (5.10) és (5.13) integrálegenleteket  $z^n$ -nel való szorzás és integrálás után átírhatjuk  $D(z)$ ,  $\Delta(z)$  és  $d(z)$  momentumait tartalmazó algebrai összefüggésekké és ezekből  $d(z)$  momentumait kiküszöbölve  $\Delta(z)$  és  $D(z)$  momentumait tartalmazó nemlineáris algebrai összefüggéseket kapunk.

#### *A modell kísérleti ellenőrzése*

A kapott összefüggések ellenőrizhetők a  $\gamma_p + p \rightarrow \pi^\pm + \dots$  kísérleti adatok [28, 29] segítségével. Ezekben a kísérletekben töltött pionokra a következő függvényt mérik:

$$F(z, p_\perp^2) = \frac{E}{\sigma_{\text{tot}}} \frac{d^3\sigma}{d^3p} \approx e^{-Bp_\perp^2} F(z, 0) \quad (5.15)$$

ahol  $B = 5,5 \pm 0,6 \text{ GeV}/c^2$ ,  $z = P_L/P_{\text{max}}$ . A virtuális foton tömege:  $-q^2 = Q^2 \sim 2 \text{ GeV}^2$ , energiája  $\nu \sim 4 \text{ GeV}$  volt. Az adatok a  $0,2 < z < 0,7$  tartományban skálaviselkedést mutatnak.

A pionok  $z$  szerinti eloszlása:

$$N = \frac{1}{\sigma_{\text{tot}}} \int d^2p_\perp \frac{d^3\sigma}{d^2p_\perp dz} = \frac{\pi}{B} F(z, 0). \quad (5.16)$$

Az  $N^+$ ,  $N^-$  eloszlások kifejezhetők a  $D^+$ ,  $D^-$  kvark fragmentációs függvényekkel:

$$\begin{aligned} N^+ + N^- &= \frac{4(u + \bar{u}) + (d + \bar{d})}{4(u + \bar{u}) + (d + \bar{d}) + (s + \bar{s})} (D^+ + D^-) \approx D^+ + D^-, \\ N^+ - N^- &= \frac{4(u - \bar{u}) - (d - \bar{d})}{4(u + \bar{u}) + (d + \bar{d}) + (s + \bar{s})} (D^+ - D^-), \end{aligned} \quad (5.17)$$

ahol  $u \equiv u(x)$ ,  $d \equiv d(x)$ , ... a kvarkok eloszlásfüggvényei a protonban, és  $x = Q^2/2M\nu$  a Bjorken változó. Mivel  $N^+ - N^-$  faktorizálódik  $x$ -ben és  $z$ -ben, a  $\Delta = D^+ - D^-$  függvényt ebből elvileg meghatározhatjuk. A jelenlegi kísérleti adatok értékelésénél azonban célszerűbb, ha a kvarkok eloszlásfüggvényeit az  $e + p \rightarrow e + \dots$  inkluzív reakcióból határozzuk meg.  $x = Q^2/2M\nu \approx 0,25$ -re jogosan feltételezhetjük, hogy a valencia-kvarkok eloszlása:  $u_v = 2d_v$ , a semleges kvark tengerre pedig  $u_c = \bar{u}_c = d_c = \bar{d}_c$  és  $s_c = \bar{s}_c = 0$ . Ekkor a még ismeretlen  $d_c/d_v$  arányt meghatározhatjuk a mért  $F_1^{en}/F_1^{ep}$  hányados segítségével. Ezekkel a feltevésekkel  $d_c \approx 0,3 d_v$ , és így

$$D^+ - D^- \approx 1,7(N^+ - N^-).$$

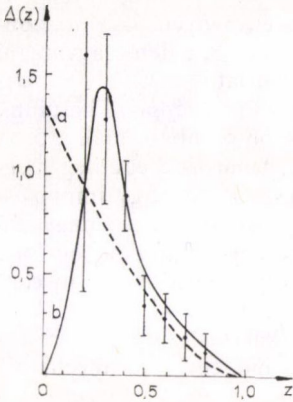
A 7. ábrán láthatók a kísérleti adatok a  $\Delta(z) = D^+ - D^-$  mennyiségre.  $\Delta(z)$  integrálja ezekből:

$$\int_{0,2}^1 \Delta(z) dz = 0,36 \pm 0,09.$$

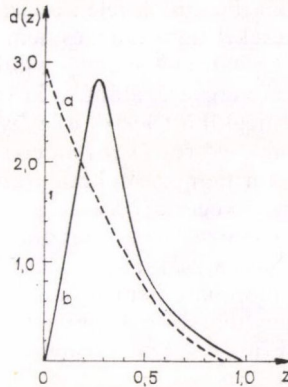
Ahhoz, hogy az (5.9) összegszabályt teljesítsük,  $\Delta(z)$ -t két szélsőséges módon folytathatjuk kis  $z$  értékekre (7. ábra, (a) és (b) görbék; az (a) görbe éppen egy (5.14)-ben felírt típusú:  $d(z) = 3(1-z)^2$ ; ebben az esetben ismerjük az egzakt megoldást).



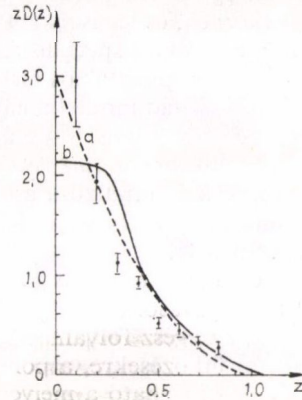
A 8. ábra a  $d(z)$  függvényt mutatja, amelyet iteráció segítségével határoztunk meg (5.13)-ból, a fentebb említett kétféle  $\Delta(z)$  függvényből kiindulva. A 9. ábrán az (5.10') integrálegyenlet megoldása és a  $zD(z)$  függvényre vonatkozó kísérleti adatok láthatók.



7. ábra A kísérleti adatok és két lehetséges folytatás a  $\Delta(z) \equiv D_+ - D_- \approx 1,7 \cdot (N_+ - N_-)$  függvényre.  $\Delta(z)$  integrálja mindkét esetben  $\frac{1}{2}$ .



8. ábra Az (5.13) integrálegyenlet megoldásai, amelyek a 7. ábra (a) és (b) görbéinek felelnek meg.



9. ábra. Kísérleti adatok a  $zD(z) = \frac{2}{3} z(D_+ + D_-)$  függvényre és az (5.10) egyenlet megoldásai az (a) és (b) esetre.

A plató magassága, mindhárom pion-állapotot figyelembe véve,

$$2 < c < 4.$$

Ez közelítőleg megegyezik a hadronikus kísérletekben észlelt plató-magassággal:  $C_h \approx 3$ .

Bár a  $Q^2 = 2 \text{ GeV}^2$  érték túl kicsi a kísérlettel való összehasonlításra, a 8. ábra szerint a kvark kaszkád modell eredményei összhangban vannak a jelenlegi adatokkal.

Végül vizsgáljuk meg a fejezet elején említett (b) feltevést. Az interferencia-tagok eltűnnek, ha az elsőként kisugárzott pion rapiditása mindig nagyobb, mint a másodiké stb. Modellünkben ez csak akkor igaz, ha

$$\frac{\delta \Delta y}{\langle \Delta y \rangle} \ll 1, \quad (5.18)$$

ahol  $\langle \Delta y \rangle$  két szomszédos pion rapiditás-különbsége,  $\delta \Delta y$  pedig a megfelelő diszperzió. Ezeket  $d(z)$ -ből kiszámíthatjuk és így elvben ellenőrizhetjük modellünk önkonzisztenciáját. A fenti hányados azonban nagyon erősen függ a  $\Delta(z)$  függvény  $z=0$  körüli viselkedésétől.

A modell következményeként a rapiditásuk szerint sorba állított pionok töltései többnyire alternálóak lesznek. Ha csak két piont detektálnak, és rapiditásbeli távolságuk kicsi ( $\Delta y < \langle \Delta y \rangle$ ), akkor töltéseik nagy valószínűséggel különbözők lesznek. Ez a valószínűség erősen függ az (5.18) hányadostól, így a két-részecske töltés—impul-



zus korrelációs függvények hasznos információval szolgálhatnak a produkciós mechanizmusról.

Felmerül a kérdés: ha a pionok valóban kaszkád-sugárzás útján keletkeznek, milyen mélyebb mechanizmus áll emögött. Nemrég *Preparata* és *Craigie* [30] javasoltak egy olyan modellt, amelyben teljesülnek a feltevéseink: a pionok egyenként keletkeznek, és lépésenként igaz a Feynman-féle skálázás. Véleményem szerint azonban a modell túl speciális feltevéseket tartalmaz, és nem tudja egyszerűen magyarázni a parton fragmentációs tartományban észlelt töltés asszimmetriát.

A kaszkád modell dinamikai magyarázatánál a következő problémával kerülünk szembe: a virtuális foton által meglökött kvark a leggyorsabb pionban található, ez pedig a  $p$  kvarkimpulzusnak csak  $z$ -ed részével rendelkezik, tehát az eredetileg meglökött kvark impulzusa a pionban már csak kb.  $\frac{1}{2} \cdot zp$  lesz. Ilyen nagy impulzusátadáshoz vagy hosszú ideig ható véges erő, vagy pedig véges ideig ható nagy erő kell. Első látásra mindkét lehetőség nehezen illeszthető be egy dinamikai leírásba.

Újabban azonban *F. Low* [31] a zsák-elmélet alapján olyan produkciós mechanizmust javasolt, amelyben a pionokat nem egyenként sugározza ki a meglökött kvark, az egész folyamatra mégis teljesül a Feynman-féle skálázás. (*Low* a hadron—hadron ütközésekre, a pomeron magyarázatára javasolta a modellt, de a mechanizmus alkalmazható a mélyen rugalmatlan lepton—hadron ütközésekre is. Ezzel a modellel a zsák-elmélet tárgyalása után, a VIII. fejezetben foglalkozunk majd.) A *Low* modellben, mint látni fogjuk, véges erő hat véges ideig — a megfelelő tömegközépponti rendszerben. A labor-rendszerben egyszerűen az idődilatació miatt észleljük  $p$ -vel arányosnak az erőhatás időtartamát. Ezenkívül kiderül majd, hogy a pion-emissziók sorrendje a *Low* modellben rendszerfüggő — az egyes eseményeket térszerű intervallumok választják el — és ha az emissziók sorrendjétől eltekintünk, a fentebb tárgyalt kaszkád modellhez nagyon hasonló mechanizmust kapunk. (Megjegyezzük még, hogy az integrálegyenletek levezetésénél nem volt lényeges az emissziók időbeli sorrendje.)

## VI. A partonok izospinjéről

Van az előző fejezetben tárgyalt kaszkád-modellnek egy általánosabb érvényű következménye, amely azon alapul, hogy a pionokat kisugárzó objektum (az  $u$  vagy  $d$  kvark)  $\frac{1}{2}$  izospinű. Ilyenkor minden egyes emisszió  $\frac{1}{3}$  valószínűséggel semleges piont,  $\frac{2}{3}$  valószínűséggel töltött piont eredményez. Többen megjegyezték [35, 13], hogy ez lehetőséget nyújt az  $\frac{1}{2}$  izospin igazolására.

Ha egy ilyen folyamatban  $n$  pion keletkezik, akkor annak a valószínűsége, hogy ebből  $n_0$  semleges pion, binomiális eloszlást követ [40]:

$$P_n(n_0) = \binom{n}{n_0} \left(\frac{1}{3}\right)^{n_0} \left(\frac{2}{3}\right)^{n_1}, \quad n_0 + n_1 = n \quad (6.1)$$

( $n_1$  a töltött pionok száma). Természetesen ez az állítás sokkal több információt tartalmaz, mint az, hogy átlagosan a pionok  $\frac{1}{3}$ -a semleges — ez utóbbi már az izotóp-invarianciából következik.

A binomiális eloszlás közvetlen ellenőrzése kísérleti nehézségekbe ütközik. Lepton—hadron ütközésekben a töltött részecskék számának eloszlását sem mérték



még ki. Hadron—hadron ütközésekben ismerjük a töltött részecskék számának eloszlását, és néhány kísérleti csoport adatokat közölt a semleges pionok átlagmultiplicitásáról a töltött részecskék számának függvényében [41]. A következőkben a binomiális eloszlás hipotézisét ezeknek az adatoknak a segítségével fogjuk ellenőrizni.

Jelöljük  $p_n$ -nel annak a valószínűségét, hogy egy ilyen folyamatban  $n$  pion keletkezik,  $W_{n_1}$ -gyel, hogy  $n_1$  töltött pion keletkezik, és  $W_{n_1}(n_0)$ -lal azt a feltételes valószínűséget, hogy rögzített  $n_1$  mellett  $n_0$  semleges piont kapunk. Annak a valószínűsége, hogy a folyamatban  $n_0$  semleges  $n_1$  töltött pion keletkezzék, kétféleképpen is felírható és a két kifejezés egyenlő:

$$p_n \binom{n}{n_0} \left(\frac{1}{3}\right)^{n_0} \left(\frac{2}{3}\right)^{n_1} = w_{n_1} W_{n_1}(n_0), \quad n_0 + n_1 = n. \quad (6.2)$$

Ha  $w_{n_1}$  adott bármely  $n_1$ -re, akkor (6.2)-ből meghatározhatjuk  $p_n$ -et és  $W_{n_1}(n_0)$ -at is. Ezt legegyszerűbben a megfelelő generátorfüggvények segítségével érhetjük el [40]. Mi azonban itt csak a kísérletileg mért

$$\langle n_0 \rangle_{n_1} = \sum_{n_0} n_0 W_{n_1}(n_0) \quad (6.3)$$

függvényre vagyunk kíváncsiak, így más utat választunk. Összegezzük a (6.2) egyenletet  $n_0$  szerint, rögzített  $n_1$  mellett. Ekkor a

$$\sum_{n_0} W_{n_1}(n_0) = 1 \quad (6.4)$$

normálási feltétel miatt azt kapjuk, hogy

$$w_{n_1} = \sum_{n_0} p_n \binom{n}{n_0} \left(\frac{1}{3}\right)^{n_0} \left(\frac{2}{3}\right)^{n_1} \quad (6.5)$$

ahol  $n_1$  rögzített, és  $n = n_0 + n_1$ .

Most szorozzuk be (6.2)-t  $n_0$ -lal és ismét összegezzünk  $n_0$  szerint:

$$w_{n_1} \langle n_0 \rangle_{n_1} = \sum_{n_0} p_n \binom{n}{n_0} \left(\frac{1}{3}\right)^{n_0} \left(\frac{2}{3}\right)^{n_1} \cdot n_0.$$

Viszont

$$n_0 \binom{n}{n_0} = (n_1 + 1) \binom{n}{n_0 - 1},$$

így (6.5)-öt alkalmazva

$$w_{n_1} \langle n_0 \rangle_{n_1} = \sum_{n_0} p_n \binom{n}{n_0 - 1} \left(\frac{1}{3}\right)^{n_0} \left(\frac{2}{3}\right)^{n_1} (n_1 + 1) = \frac{n_1 + 1}{2} w_{n_1 + 1}.$$

(A binomiális eloszlásnak köszönhető, hogy a jobb oldalon csak egy tag szerepel. Más esetben, általában véve,  $\sum_{n'_1} C_{n_1 n'_1} w_{n_1}$ , alakú összeget kapnánk.)

Tehát

$$\langle n_0 \rangle_{n_1} = \frac{n_1 + 1}{2} \cdot \frac{w_{n_1 + 1}}{w_{n_1}}. \quad (6.6)$$

A fenti képlet kísérleti kiértékelésénél egy kis nehézséget okoz, hogy nem közvetlenül a töltött pionok számát mérték, hanem a töltött részecskékét. A  $\pi^-p$  ütközésben a proton továbbra is proton marad (az ún. vezető részecske jelenség), így feltételezhetjük, hogy  $n_1 = n_{ch} - 1$ , ahol  $n_{ch}$  a töltött részecskék száma. Ez az eltérés azonban csak kis korrekciót jelent.

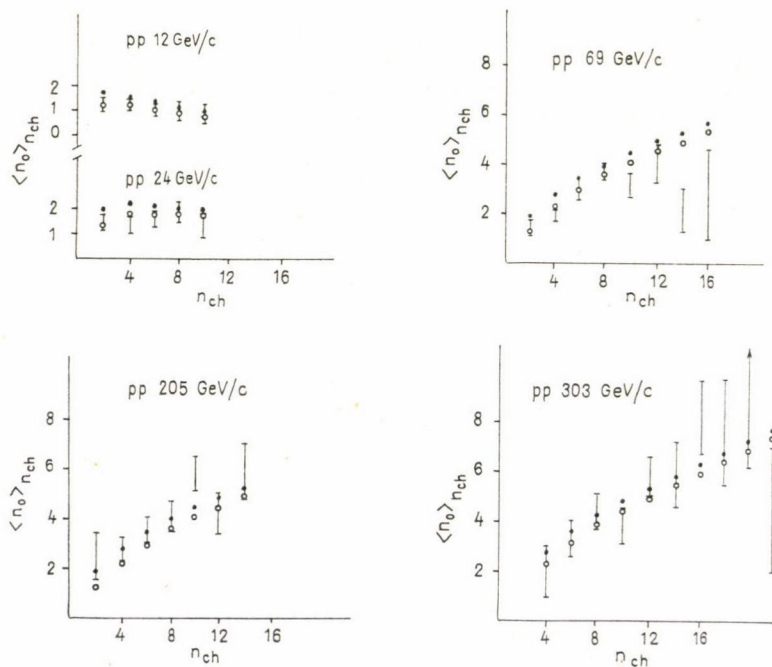
A kísérleti adatokkal való összehasonlítás a 10. ábrán látható. Az egyezés meglepően jó. Ahhoz, hogy lássuk, hogy ez nem triviális — tehát valóban a binomiális eloszlás, vagyis az  $\frac{1}{2}$  izospinú közbenső állapotok következménye —, tekintsük a következő modellt:

Keletkezzenek a pionok egy olyan bomlási láncban, amely  $\varrho$ ,  $\omega$  alternáló sorozatból áll, tehát 1 és 0 izospinú objektumok sugározzák ki a pionokat. Könnyű belátni, hogy ez a folyamat a semleges ( $\pi^0\pi^0$ ) és a töltött ( $\pi^+\pi^-$ ) párok számában eredményez binomiális eloszlást, így most

$$\langle n_0 \rangle_{n_1} = \frac{n_1 + 2}{2} \cdot \frac{w_{n_1+2}}{w_{n_1}}. \quad (6.7)$$

Mint a 11. ábrán látható, ez az összefüggés erősen ellentmond a kísérleti adatoknak.

Érdeemes aláhúzni, hogy a (6.6) összefüggés levezetése csak azt használja ki, hogy a pionokat „kisugárzó” objektum izospinjé  $\frac{1}{2}$ , és független a pionprodukciónak dinamikájának egyéb részleteitől — tehát pl. attól, hogy a pionok egy láncbomlás során egyenként, egymás után keletkeznek, vagy pl. egyszerre stb.



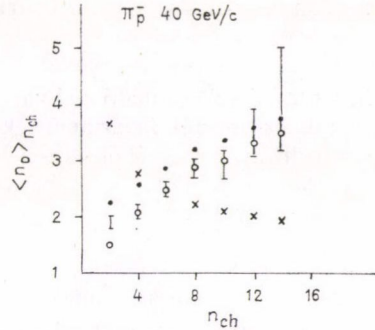
10. ábra.  $\langle n_0 \rangle_{n_{ch}}$  pp szórásban különböző energiákon. A szakaszok a kísérleti adatokat jelzik;  $\bullet$  a (6.6) egyenlet alapján számított jóslat, azzal a feltevessel, hogy  $n_{ch} = n_1$ ;  $\circ$  figyelembe véve a vezető részecske jelenséget



Gondolatmenetünk csak az  $\frac{1}{2}$ -nél nagyobb izospinú elsődleges objektumokat zárja ki; 0 izospinúek természetesen szintén lehetnek. Az a tény azonban, hogy a keletkezett részecskék többsége (kb. 80%-a) pion, arra utalhat, hogy pl. az  $u \rightarrow \pi^+ d$  folyamat valószínűbb, mint az  $u \rightarrow K^+ s$ . Ennek lehet az oka a ritka kvark nagyobb tömege.

A partonok (pontosabban a pionokat kisugárzó objektumok) izospinjére kapott  $\frac{1}{2}$ -es felső korlát meggyőzőbb lehetne, ha a semleges pionok számának magasabb momentumait is tudnák mérni. Sajnos a semleges pionokat csak alacsony hatásossággal lehet detektálni, így a magasabb momentumok nagyon bizonytalanok.

Hasonló eloszlások segítségével választ kaphatunk a hadronok alkotórészeinek egyéb jellemzőiről is — így pl. a  $K-\pi$  korrelációkból a ritkaságról, a produkció SU(3) invarianciájáról. Külön érdekes lenne feltevéseinket az elméletileg tisztább lepton—hadron szórásban ellenőrizni.



11. ábra. A szakaszok a kísérleti adatokat jelzik;  $\bullet$   $n_{ch}=n_1$ ;  $\circ$   $n_{ch}=n_1+1$ ;  $\times$  a (6.7) egyenlet alapján számított jóslat.

## VII. A zsák-elmélet

Ebben a fejezetben röviden összefoglaljuk azokat a zsák-elmélettel kapcsolatos tudnivalókat, amelyek a következő fejezet megértéséhez szükségesek.

A zsák-modellek egy lehetséges választ jelenthetnek arra, hogy hogyan lehet Lorentz-invariáns módon összezární („bebörtönözni”) könnyű kvarkokat úgy, hogy mélyen rugalmatlan lepton—hadron szórásban szabad részecskéként viselkedjenek, mégse jelenjenek meg a végállapotban külön-külön.

Az utóbbi időben több olyan modell született, amely alkalmas a kvark bebörtönzés leírására:

- a húr modell [42],
- nemábeli mérték-terekkel történő bebörtönzés [43],
- különböző zsák-modellek [32, 36, 44], amelyekben a részecskék, már klaszszikus szinten is, egy véges térrészbe, a zsákba vannak bezárva. A zsák fala nem merev, hanem a benne levő részecskék állapota határozza meg (esetleg külön szabadsági fokkal is rendelkezik) és ez teszi lehetővé az elmélet Lorentz-invariáns megfogalmazását.

Bár a következő fejezetben ismertetett kvark fragmentációs modell nem kötődik egy speciális kvark bebörtönzési elmélethez, a továbbiakban az egyszerűség kedvéért az MIT zsák-modellt fogjuk használni [32].

A zsák egy véges V térrész, amelyben kvarkok és gluonok mozoghatnak. A kvarkok rendelkeznek a szokásos SU(3) kvantumszámokkal. Ilyen szempontból lehetnek  $u, d, s$  kvarkok. Ezenkívül azonban rendelkeznek egy ettől független SU(3) struktúrával is („színesek”) és a szín — SU(3) csoport tripllett ábrázolásaihoz tartoznak: három független szín-állapotban lehetnek  $R, W, B$  (piros, fehér, kék). A kvarkokon kívül a zsákban gluonok is vannak. Ezek a szokásos SU(3) szerint szinglettek



— viszont a szín — SU(3) szerint oktettként viselkednek, tehát a szokásos értelemben semlegesek (nincs elektromos, hiper- és bariontöltésük), de van színtöltésük.

Lorentz-szerkezetüket tekintve a gluonok mérték-vektor terek — olyanok mint az elektromágneses tér: nulla tömegűek és a kvarkokhoz lokális mérték-invariáns módon vannak csatolva: a kvarkok szabad Lagrange-függvényéből a

$$\partial_\mu \rightarrow \partial_\mu + ig A_\mu(x)$$

helyettesítéssel kapható a kvark-gluon kölcsönhatás (ahol  $g$  a kvark szín-töltése). A lokális mérték-invariancia következményeként teljesült a Gauss-tétel: minden szín-töltött részecskéből szín-elektromos erővonalak indulnak ki.

A zsák felületén az a határfeltétel, hogy a szín-elektromos erővonalak párhuzamosak a felülettel:

$$E \cdot n = 0$$

( $n$  felület normálisa). Ennek és a Gauss-tételnek az a következménye, hogy a zsák nem rendelkezik semmilyen szín-töltéssel: a zsákok, azaz a megfigyelt hadronok szín-szinglettek. Ez a követelmény biztosítja azt, hogy a zsákok csak  $q\bar{q}$ ,  $qqq$ ,  $qqq\bar{q}$ , ... alakú kombinációkat tartalmazhatnak.

A szín SU(3) egy különös szimmetria-tulajdonság: közvetlenül nem figyelhető meg. A hadronok szintelenek és minden kölcsönhatás szín invariáns. Úgy tűnik, hogy itt nem igaz az az ismert állítás, hogy egy invariancia-tulajdonság akkor válik érdekessé, ha sérül. A szín-SU(3) invarianciának fontos közvetett következményei vannak:

— Biztosítja a spin és statisztika helyes viszonyát. Ha nem lenne a szín-szabadsági fok, a Pauli-elv megtiltaná pl., hogy három  $u$  kvark azonos spin- és térbeli hullámfüggvénnyel rendelkezzenek ( $A_{3/2}^{++}$ ), míg így a szín-változóban antiszimmetrizálni lehet a hullámfüggvényt.

— Az előbb említett módon megmagyarázza a triálitás szabályát (a kvarkok és antikvarkok számának különbsége osztható hárommal).

— Megadja az

$$R = \frac{\sigma(e^+e^- \rightarrow \text{hadronok})}{\sigma(e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-)} \approx 2 \quad (\sqrt{s} < 4 \text{ GeV})$$

hányados helyes értékét ( $\sqrt{s}=4$  GeV alatt; előlött feltehetően újabb csatornák nyílnak meg:  $u, d, s$  kvarkok mellett  $c$ , „charmed” kvarkok is keletkezhetnek). Az elméleti jóslat szerint  $R$  a kvark-töltések négyzetösszege:

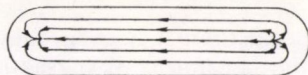
$$R = \sum_{\alpha} Q_{\alpha}^2.$$

Ha csak az  $u, d, s$  kvarkra összegzünk, akkor  $R=2/3$ , ha a háromfajta szín-állapotra is, akkor  $R=3 \cdot \frac{2}{3}=2$ .

A zsák belsejében levő kvarkok és gluonok nyomást gyakorolnak belülről a zsák falára. Hogy ezt ellensúlyozzuk, be kell még vezetnünk egy térfogati [32] vagy felületi [44] feszültséget. Ez a térfogattal vagy a felülettel arányos tagot jelent a Lagrange-függvényben. Számunkra nem lesz lényeges a különbség. A továbbiakban térfogati feszültséggel fogunk számolni.



Nézzük meg, hogyan képes a fenti zsák-modell bezárni a kvarkot! Tekintsünk egy olyan zsákot, amelyben egy kvark-antikvark pár van. Ha ezeket eltávolítjuk egymástól, a köztük feszülő szín-elektromos erővonalak továbbra is összekötik őket — így a zsák a két kvark között cső alakú lesz:



A továbbiakban az egyszerűség kedvéért eltekintünk a szín-SU(3) szimmetriával kapcsolatos problémáktól, helyett az elektromágneses térrel megegyező tulajdonságú ábeli vektor gluonokról és ezeknek megfelelő (szín-) töltésű kvarkokról fogunk beszélni.

A Gauss-tétel alapján a csőben a térerősség:

$$E = \frac{4\pi g}{R^2\pi} = \frac{4g}{R^2}. \quad (7.1)$$

ahol  $g$  a kvark töltése,  $R$  pedig a cső sugara. Egy  $L$  hosszúságú cső teljes energiája így:

$$\mathcal{E} = \frac{1}{8\pi} E^2 \cdot R^2\pi L + B \cdot R^2\pi L = \left( \frac{2g^2}{R^2} + BR^2\pi \right) \cdot L, \quad (7.2)$$

ahol a második tag a fentebb említett térfogati feszültségből ered. Ha az energiát adott  $L$  mellett minimalizáljuk, azt kapjuk, hogy

$$R^4 = \frac{2g^2}{B\pi}, \quad (7.3)$$

és

$$\mathcal{E} = \frac{4g^2}{R^2} \cdot L. \quad (7.4)$$

Tehát a cső átmérője nem függ  $L$ -től, az energia viszont arányos a cső hosszával, vagyis a széthúzott kvarkok között a távolságuktól független, állandó erő hat. Ez biztosítja a kvarkok bezártságát.

Bár a zsák-modell a kvark bebörtönzés, tehát egy nagyenergiás paradoxon magyarázatára született, a belőle kiszámítható alacsony-energiás adatok mégis meglepően jól egyeznek a kísérleti értékekkel. A modellben szereplő két paraméter ( $g$  és  $B$ ) segítségével kiszámíthatók a következő adatok [32, 36, 44, 45]:

nukleon sugár,

nukleon tömeg,

a proton és nukleon mágneses momentuma,

különböző elektromágneses átmenetek valószínűsége (pl.  $\Delta^+ \rightarrow p + \gamma$ ), a Regge trajektoriak meredeksége (a húr modellben  $\alpha'(0) = 1/(2\pi\lambda)$ , ahol  $\lambda$  a húr hosszegységére jutó energia. Itt  $\lambda = \mathcal{E}/L = 4g^2/R^2 \sim 0,2 \text{ GeV}^2$ , míg  $\alpha'(0) \sim 0,9 \text{ GeV}^{-2}$ ), a  $\psi$  részecskék tömegspektruma és élettartama.

A fenti adatok a csatolási állandóra és a cső sugarára a

$$g^2 \sim \frac{1}{5}, R \sim 0,4 \text{ fm}$$

értéket eredményezik.

A következő fejezetben látni fogjuk, hogy a nagyenergiás jelenségek alapvető jellemzői is természetes módon magyarázhatók a zsák-modellben [31].

### VIII. Fragmentáció a zsák-modellben

A mélyen rugalmatlan lepton—hadron szórásban végbemenő sokrészeske-keltés feltehetően szoros kapcsolatban van a kvark-bebörtönzés mechanizmusával. Ha a kvarkok nem lennének összezárva, a meglökött kvark kirepülne, és nem kényszerülne arra, hogy a végállapotban észlelt hadronokat létrehozza.

A sokrészeske-keltés magyarázatára a zsák-modellt először *F. Low* alkalmazta [31]. *Low* a hadron—hadron szórásban a pomeronnal kapcsolatos jelenségeket írta így le, de hasonló módon értelmezhetők a nagyenergiás lepton—hadron szórás és az  $e^+e^- \rightarrow$  hadronok reakció jellegzetességei is.

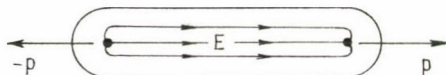
Miután az  $ep \rightarrow e + \dots$  szórásban a virtuális foton meglöki a protonban található valamelyik kvarkot, az a többitől közel fénysebességgel távolodik. Mivel a meglökött kvark és a maradék is színtöltéssel rendelkezik, így őket az előző fejezetben leírt cső köti össze.

Teljesen hasonló képet kapunk az  $e^+e^- \rightarrow \dots$  folyamatban is; ebben egy színes kvark és színes antikvark keletkezik és repül szét.

*Low* feltételezése szerint a nagyenergiás hadron-hadron ütközésekben az a folyamat dominál, amikor a két hadron egy puha vektor-gluont cserél ki. A vektor csere konstans hatáskeresztmetszetet eredményez — ezzel magyarázható a Pomeron. A fotontól eltérően a gluon maga is rendelkezik (szín-) töltéssel, így az ütköző hadronok megszínesedve repülnek szét, egy közös zsákban, amelynek belsejében szín-erővonalak futnak, mintegy köldökzsinórként összekötve a szétfutó hadronokat. Ez okozza, *Low* szerint, hogy egy valódi vektor-mezon cseréjétől eltérően, a színes vektor-gluon csere a rugalmatlan ütközéshez ad járulékot.

Tehát a három reakcióban különböző az első lépés, de mindegyik hasonló objektum keltéséhez vezet. Így érthető az a kísérleti tény, hogy mindhárom reakció hasonló sokrészeske eloszlást eredményez.

A továbbiakban az egyértelműség kedvéért az  $e^+e^-$  annihilációról fogunk beszélni.



Amint a  $q\bar{q}$  párt összekötő cső elég hosszúra nyúlt, egy új kvark-antikvark pár keletkezhet benne. A homogén, állandó elektromos erőterben a párkeltés alagút-effekttussal jöhet létre [37, 44]. Virtuálisan keletkezik egy pár — ehhez  $2mc^2$  energia lenne szükséges — majd ezután a kvark és az antikvark eltávolodnak egymástól,



energiát nyernek az erőter rovására, és így helyreállhat az energiamérleg. Ehhez az szükséges, hogy

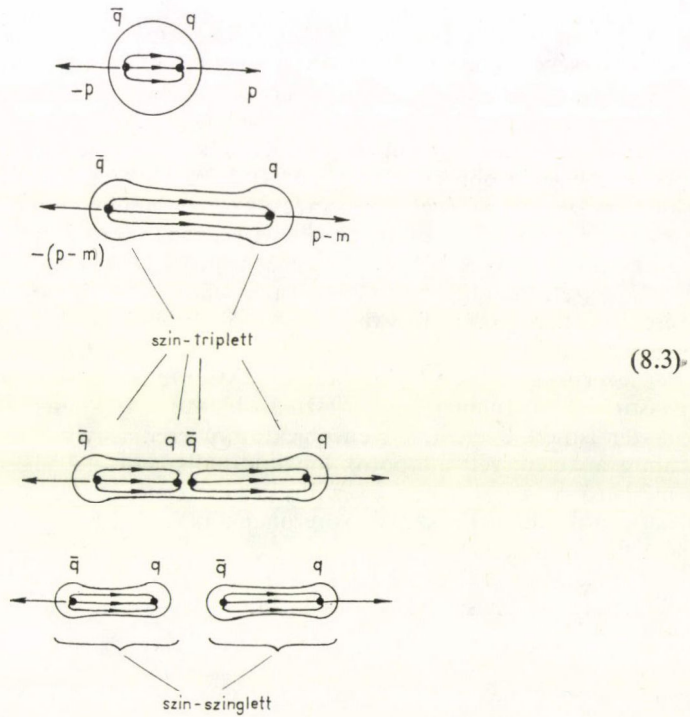
$$gEL \cong 2m \quad (c = 1) \quad (8.1)$$

legyen, ahol  $m$  az a legkisebb kvark energia, amit a transzverzális impulzusbizonytalanság megenged:

$$m \sim \frac{1}{2R} \sim 0,3 \text{ GeV} \quad (8.2)$$

(Ez megegyezik a végállapotban észlelt hadronok átlagos transzverzális impulzusával.)

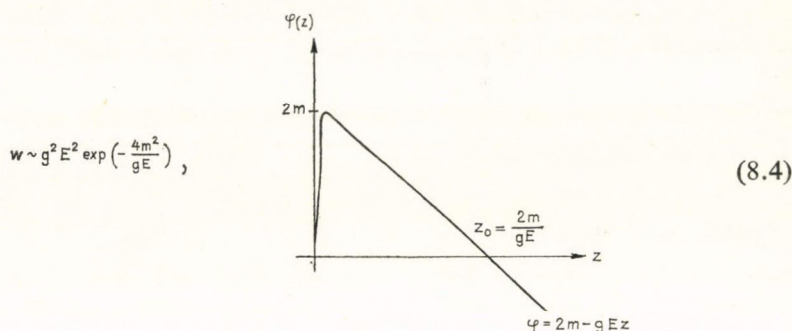
Mivel az  $E$  erővonalak az újonnan keletkezett  $q$  és  $\bar{q}$  között megszűnnek, a zsák itt befűződhet és kettészakadhat, az így keletkezett két színtelen objektum pedig elszakad egymástól. A folyamatnak ezeket a lépéseit a következő ábrákon szemléltethetjük:



A következő fontos kérdés, hogy mennyi idő alatt és melyik részén szakad el a zsák, és mekkora a keletkezett  $q\bar{q}$  pár impulzusa. Azt fogjuk feltételezni, hogy az eredeti  $q\bar{q}$  tömegközépponti rendszerében a zsák rögtön elszakad, amint a (8.1) feltétel teljesül; középen szakad el és az új  $q\bar{q}$  pár „állva” keletkezik.

Ha a zsák túlságosan hosszúra nyúlna addig, amíg elszakad, lefékezne a szétrepülő kvark párt, míg kísérletileg azt találjuk, hogy a fragmentációs tartomány szinte

az egész eredeti impulzust tartalmazza. A párkeltés valószínűségét megbecsülhetjük az alagúteffektus ismert képletének segítségével is:



ahol  $q^2 E^2$  a csatolási állandó négyzete, míg  $\frac{4m^2}{gE} = \varphi_0 z_0$  a potenciálgát magasságának és szélességének szorzata. Ebből megbecsülhetjük a cső hosszát az elszakadás pillanatában, amire a fentiekkel összhangban néhány fermi adódik.

Azon, hogy a kvark pár „állva” keletkezik, itt csupán azt értjük, hogy nem ultra-relativisztikusan nagy impulzussal rendelkeznek. Ennek az az oka, hogy egy gyors pár keltéséhez nagyobb energiára van szükség, és (8.4)-ben az exponenciális (Gamow-faktor)  $m$  növelésével gyorsan csökken. Paradox kérdés azonban a következő: melyik rendszerben keletkezik állva a  $q\bar{q}$  pár? Mi tünteti ki a tömegközépponti rendszert, hiszen a zsák két vége sok más rendszerben is majdnem  $+c$  és  $-c$  sebességgel rohan szét, egy  $E_z = \text{const}$  elektromos térerősség pedig  $z$ -boost invariáns? Erre az érdekes kérdésre a folyamat tér-időbeli lefolyásának vizsgálatakor fogunk majd választ adni.

Térjünk vissza a (8.3) ábrákhoz. Miután a zsák kettészakadt, két, az eredetihez hasonló, longitudinálisan gerjesztett objektumot kapunk. Ezek ismét kettéhasadnak;  $n$ -szer ismétlődve ez  $2^n$  ilyen objektumot eredményez. A bomlás addig folytatódik, amíg a keletkezett állapotok longitudinális gerjesztettsége (invariáns tömege) összemérhető nem lesz a transzverzális gerjesztettséggel (0,3 GeV). Ezek még nem stabil hadronok, de már a szokásos rezonanciákhoz hasonlóan bomlanak a végállapotban észlelt részecskékre.

Tekintsük a fenti folyamatot a rapiditás-változóban. Kezdetben a két szétfutó részecske rapiditása  $-\ln 2p$  és  $\ln 2p$ :



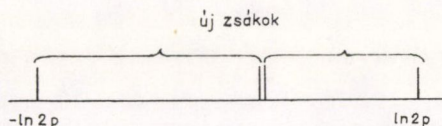
A párkeltéshez szükséges energia kissé csökkenti a kvarkok impulzusát,  $p$ -ről  $(p-m)$ -re. A rapiditás viszont alig változik:

$$\ln 2(p-m) \approx \ln 2p - \frac{m}{p} \approx \ln 2p, \quad \text{ha } m \ll p.$$

Másszóval, ha a longitudinálisan gerjesztett zsák kvarkjai a rapiditás-térben elég messze vannak egymástól ( $\Delta y \geq 3$ ), akkor rapiditásukat a párkeltés elhanyagolható



mértékben változtatja meg. A párkeltés és a zsák elhasadása után a következő rapiditás-ábrát kapjuk



Ebből az egyszerű képből máris megkapjuk az ismert fragmentációs tulajdonságokat.

Az eredeti zsákból származó hadronok multiplicitása nyilvánvalóan megegyezik a két új zsákból jövő hadronok multiplicitásainak összegével. Viszont ugyanez igaz a zsákok rapiditásbeli kiterjedésére is:  $\Delta y = \Delta y_1 + \Delta y_2$ . Így a multiplicitás arányos kell legyen a rapiditásintervallum hosszával, azaz

$$n \sim \text{const} \cdot 2 \ln 2p,$$

vagy

$$n \sim C \cdot \ln s. \quad (8.5)$$

A fentiek igazak maradnak, amíg a zsákok tömege elég nagy,  $\sqrt{s} \cong 2-3$  GeV. Egy ilyen rezonancia átlag kb. 5 piont tud kisugározni (0,3 GeV energiával), így azt kapjuk, hogy

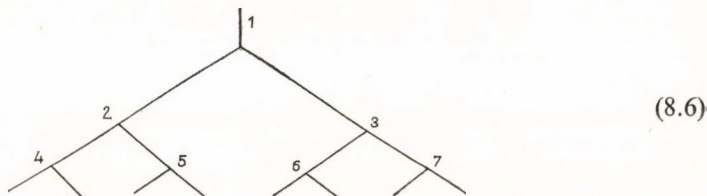
$$C \sim 3$$

összhangban a kísérleti adatokkal ( $ep$ ,  $e^+e^-$ ,  $vp$  és  $pp$  szórásban is ilyen az átlag-multiplicitás).

Természetes módon következik a fenti képből az univerzális plató és a fragmentációs tartományok létezése. A táguló zsákban keletkezett kvarkok típusa nem függ az eredeti részecskék típusától, mivel a szín-elektromos erőter invariáns a szokásos SU(3)-mal szemben. Így a rapiditás-teret egyenletesen kitöltik 2–3 GeV-es tűzgolyók, amelyek közül csak a két szélső emlékszik az eredeti kvarkok típusára. A középsők bomlása eredményezi az univerzális platót, a szélsőké az eredeti részecskék fragmentációs tartományát. Innen megkapjuk, hogy a fragmentációs tartomány szélessége megegyezik egy tűzgolyó produktumainak rapiditás-térbeli kiterjedésével:  $\Delta y \sim 2$ . Nagyobb tömegközépponti energiánál csak az a változás, hogy a két fragmentációs tartomány távolabb kerül egymástól, így az eloszlás csak az  $y_{\max} - y$  (ill.  $y - y_{\min}$ ) különbségektől függ. Másszóval, teljesül a Feynman-féle fragmentációs törvény: a tömegközépponti rendszerben jobb oldalon észlelt hadronok eloszlása csak az eredetileg jobbra futó részecske típusától, valamint a megfelelő impulzusok arányától függ.

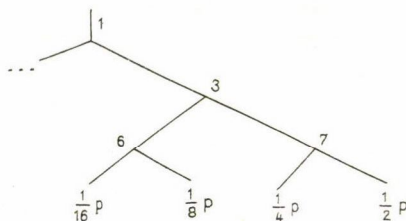
A modell a több részecske eloszlásokra is határozott jóságot eredményez: a hadronok a rapiditás-térben egyenletes eloszlású, 2–3 GeV tömegű tűzgolyókból keletkeznek. A tűzgolyók lehetséges kvantumszámait és ezek eloszlását meghatározza az, hogy a bennük levő  $q$ , ill.  $\bar{q}$  két egymástól független párkeltésből származik. Újabban a kétrészecske-eloszlások kísérleti analízise arra látszik utalni, hogy a végállapot valóban sok kistömegű tűzgolyóból származik [48].

Érdekes eredményre vezet a fenti, kozmikus záporhoz hasonló folyamat tér-időbeli leírása. A folyamatot a következő ábrával szemléltethetjük:



az első zsák kettészakad (az 1. esemény az ábrán), a keletkezett két zsák ismét ketté szakad (2. és 3. esemény) stb. Eddig ezeket az eseményeket más-más Lorentz rendszerből néztük, mindig a megfelelő kettészakadó zsák kömegközépponti rendszeréből. Milyen sorrendben következnek be ezek az események egy rögzített rendszerből nézve? Mint majd látni fogjuk, az eseményeket térszerű intervallumok választják el egymástól, és így időbeli sorrendjük koordináta-rendszer-függő. Erre a következő egyszerű gondolatmenet is utal:

Tekintsük a folyamatot pl. az  $ep$  vagy  $pp$  szórás esetén a labor rendszerből, amikor a longitudinálisan gerjesztett zsák egyik felében egy 0, másik felében egy  $p$  impulzusú részecske van ( $e^+e^-$  annihilációban ez valamelyik keletkezett kvark nyugalmi rendszerének felel meg). Az egyszerűség kedvéért a végállapotban észlelt hadronok rapiditás-távolsága legyen egyforma,  $\ln 2$  — vagyis a leggyorsabb részecske impulzusa legyen  $\frac{1}{2} P$ , az utána következőké  $\frac{1}{4} P$ ,  $\frac{1}{8} P$ , ... Így a (8.6) ábrán az impulzusokat is feltüntetve:



Az eredetileg meglökött kvark a leggyorsabb,  $\frac{1}{2} P$  impulzusú hadronban van. Ez a hadron a  $t_7$  időpontban szakadt el a többitől — ennyi ideig fékezte az eredetileg  $p$  impulzusú kvarkot a zsák összetartásáért felelős  $gE$  erő. (Emlékeztetünk arra, hogy egy állandó  $E_z$  térerősség invariáns a  $z$ -tengely menti Lorentz-transzformációkra.)

Ez az erő  $t_7$  idő alatt  $p - \frac{1}{2} p = \frac{1}{2} p$  impulzuscsökkenést okozott. A két leggyorsabb részecske  $\left(\frac{1}{4} p$  és  $\frac{1}{2} p\right)$  a  $t_3$  pillanatban szakadt el a többitől. Ennyi idő alatt a fékező-erő  $p - \left(\frac{1}{2} p + \frac{1}{4} p\right) = \frac{1}{4} p$  impulzuscsökkenést eredményezett.

Hasonlóképpen az  $\frac{1}{8} p$ ,  $\frac{1}{4} p$ ,  $\frac{1}{2} p$  részecskék a többitől a  $t_6$  pillanatban váltak el, az impulzusvesztés  $t_6$  idő alatt  $\frac{1}{8} p$  stb. Mivel a fékezőerő végig ugyanakkora, az



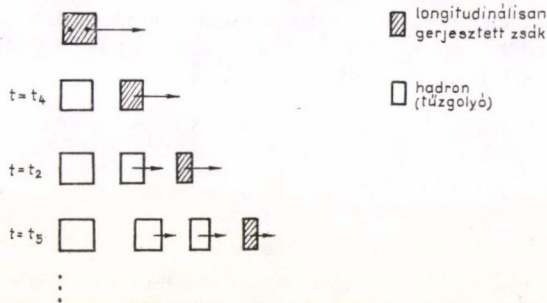
impulzusvesztesség arányos az erőhatás időtartamával. Így a (8.6) ábrán az egyes események sorrendje a *labor-rendszerben* (a (8.6.) ábrán a balra futó kezdeti részecske nyugalmi rendszerében):

$$t_4 < t_2 < t_5 < t_1 < t_6 < t_3 < t_7.$$

Természetesen az eredetileg jobbra futó részecske nyugalmi rendszerében a sorrend megfordul, a tömegközépponti rendszerben pedig

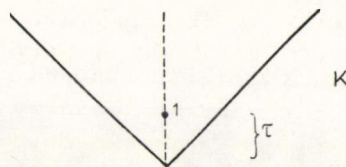
$$t_1 < t_5 = t_6 < t_2 = t_3 < t_4 = t_7.$$

Tehát minden rendszerben először a leglassúbb hadron szakad le a longitudinálisan gerjesztett zsákból, utána a következő leglassúbb stb.:

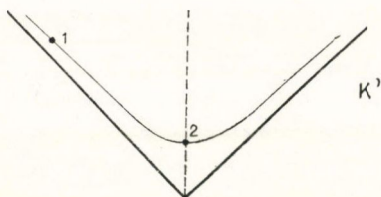


Látjuk, hogy ez a kép nagyon hasonlít az V. fejezetben tárgyalt kaszkád-bomlás modelljéhez, csak éppen a meglökött kvark először nem a leggyorsabb, hanem a leglassúbb pion „sugározza ki”. Azt is látjuk viszont, hogy az időbeli sorrend függ az észlelési rendszer megválasztásától, tehát önkényes.

A fenti intuitív képet részletesebb megfontolásokkal is alátámaszthatjuk. A virtuális foton által keltett  $q\bar{q}$  pár majdnem  $\pm c$  sebességgel halad. A transzverzális effektusoktól eltekintve úgy modellizálhatjuk a jelenséget, hogy egy kondenzátor két lemeze  $\pm c$  sebességgel távolodik, és azt kérdezzük, hogy az elektromos térerősség által elsőként keltett pár hol, mikor és mekkora impulzussal keletkezik. A feladat egzakt megoldását nem ismerjük, próbáljuk mégis meggondolni, milyen megoldást várunk. A nehézség a feladat Lorentz invarianciájában van. Az elsőként keletkezett pár impulzuseloszlása minden rendszerben egyforma kell legyen, viszont az invariáns  $dp/\varepsilon$  eloszlás nem normálható. A paradoxon megoldása az, hogy minden rendszerben más pár keletkezik elsőként. Elektrosztatikus erőterben egy pár akkor keletkezik, ha elegendő térfogat és idő áll rendelkezésére. Középen hatott legtovább az erőter, az adott rendszerben legkisebb energiája az abban álló párnak van, így okkal feltételezhetjük, hogy az első pár középen és állva keltődik. Az ehhez szükséges időt jelöljük  $\tau$ -val. Az alábbi tér—idő ábrán a pár keletkezését az 1. esemény jelenti:



Tekintsük most ugyanezt egy jobbra futó  $K'$  rendszerből! A megfelelő tér—idő ábra ekkor:



Látható, hogy a  $K'$  rendszerben az 1. esemény bekövetkezéséig sokkal több idő telik el, mint ami egy pár keletkezéséhez szükséges. Így  $K'$ -ben már előbb is keletkezik egy pár; ezt a 2. esemény jelöli. Az egyes események azonos  $\tau$  sajátidőhöz tartozó hiperbolán helyezkednek el. (Ez a tér—idő struktúra nagyon hasonlít ahhoz, amit a nagyenergiás ütközések hidrodinamikai modellje jósol [49]).

A zsákhoz visszatérve, azt kapjuk, hogy a következő állítások bármely rendszerben igazak (feltéve, hogy az adott rendszerben a szétrepülő részecskék még különböző irányba haladnak):

— A zsák két vége  $v \approx \pm c$  sebességgel mozog, hossza  $\Delta z \approx 2ct$  (nincs Lorentz-kontrakció!)

— Az első pár keltése és a zsák elszakadása a  $t = \tau$  időpillanatban következik be. A zsák ekkor  $\Delta z \approx 2c\tau$  ( $\approx$  néhány fermi) hosszúságú.

— Az elsőként kipolarizálódó  $q\bar{q}$  pár aránylag kis impulzussal (nem ultrarelativisztikusan) keletkezik.

— Először a lassú tűzgolyók keletkeznek, a leglassúbb kb.  $\tau$  idő alatt. Minél nagyobb egy tűzgolyó impulzusa, annál később szakad le a longitudinálisan gerjesztett zsákról, mégpedig az impulzusával arányos idő alatt (a relativisztikus idődilatáció miatt; a gyorsító erő állandó). Itt a tűzgolyó egy olyan zsákot jelent, amelynek a longitudinális gerjesztése még összemérhető a transzverzális tömegével. Egy ilyen zsák bomlására már nem érvényes a fenti közelítés. A tűzgolyók tovább bomlanak a végállapotban megfigyelt hadronokra.

— Az egyes tűzgolyók keletkezésének eseményeit térszerű intervallumok választják el egymástól. A tűzgolyók rapiditásbeli távolsága  $\Delta y \approx 2-3$  (ennél nagyobb rapiditáskülönbséggel rendelkező zsák még nem tűzgolyó). Egy tűzgolyóból származó hadronok már nem függetlenek, így rájuk is kb. ekkora korrelációs hossz lesz jellemző.

A sokrészecske keltés fentebb tárgyalt modellje egyszerű és szemléletes. Legfőbb erényének azt tartom, hogy anélkül, hogy az ismert zsák-modellekhez képest lényeges újabb feltevéseket vezetne be, természetes módon összekapcsolja a hadron—hadron szórást (pomeron és a vele kapcsolatos jelenségek [31]) és az  $e^+e^-$ ,  $ep$  szórást, és megmagyarázza egy sor érdekes tulajdonságukat.

Meg kell azonban említenünk, hogy a fenti modellben is van némi különbség a  $pp$ , és  $e^+e^-$ , ill.  $\bar{e}p$  szórás között. Az  $e^+e^-$  annihiláció és az  $\bar{e}p$  szórás esetén a zsák elszakadásához elég egy  $q\bar{q}$  párt kelteni, míg  $pp$  szórásban két  $q\bar{q}$  pár kell ehhez keletkezzék. A zsák lehetséges elszakadási mechanizmusai  $e^+e^-$  annihilációban

$$\bar{q} \quad q \quad \bar{q} \quad q$$

$$\Delta B = 0$$



vagy

$$\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \bar{q} & \bar{q}\bar{q} & qq & q \\ \hline \end{array} \quad \Delta B = 2$$

míg pp szórás esetén

$$\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline qq & q\bar{q} & q\bar{q} & qq \\ \hline \end{array} \quad \Delta B = 0$$

vagy

$$\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline qq & \bar{q}\bar{q} & qq & qq \\ \hline \end{array} \quad \Delta B = 2$$

( $\Delta B$  a jobbra és balra futó hadronok barionszámának különbsége). Ez az eltérés okozhat kísérletileg megfigyelhető különbséget a fenti reakciók között, pl. a töltés- és barionszám átadás valószínűségében, a korrelációs függvényekben stb.

További különbséget jelent az, hogy  $pp$  szórásban a két színes proton ismét kicserélhet egy vektor-gluont és így szabadon szétfuthat. Ez rugalmas szórást eredményez vagy, ha később történik, egy hézagot a rapiditástérben. (Ez  $\alpha = g^2$ -ben magasabb rendű effektus; kísérletileg a  $pp$  szórásban a rugalmas hatáskeresztmetszet a teljesnek kb. 10%-a.) Ez a mechanizmus az  $e^+e^-$  vagy  $\bar{e}p$  reakciókban nem állíthatja vissza szétfutó részek trialitását, így nem vezethet a zsák szétszakadásához. Ezért a reakciókban feltételezhetően nem fognak nagyobb hézagokat találni a rapiditásban.

A zsák-modell jelenleg még csak kváziklasszikus szinten van kidolgozva, de már így is nagyon sok jelenséget megmagyaráz (remélhetőleg egy teljesebb elmélet nem rontja majd el ezeket az eredményeket), és a zsák-elméletek iránti széles körű érdeklődés biztosítéka lehet a további fejlődésnek. Az elmélet továbbfejlesztésén kívül a sokrészecske keltésre vonatkozó teljesebb kísérleti információra is szükség van ahhoz, hogy túllépjünk a nagyenergiás folyamatok jelenlegi intuitív, leíró megközelítésén.

## KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁSOK

Köszönetemet fejezem ki Nagy Károly professzor úrnak, hogy az Elméleti Fizikai Tanszéken a disszertációt elkészíthettem. Az intézet ösztönző légköre jelentős segítséget nyújtott munkámban.

Köszönettel tartozom Kuti Gyulának, aki bevezetett ebbe az érdekes és azóta is dinamikus fejlődő témakörbe. A disszertációban összefoglalt munkákon dolgozva gyakran voltak segítségemre a vele folytatott megbeszélések.

Végül megköszönöm Csikor Ferencnek, Gálfi Lászlónak, Gnädig Péternek, Montvay Istvánnak, Patkós Andrásnak a számomra igen hasznos diszkussziókat.

## IRODALOM

1. F. J. Gilman and R. Taylor, International Symposium on Electron and Photon Interactions at High Energies, Liverpool, 1969. Daresbury Nuclear Physics Laboratory, 1969.
  2. H. Kendall, Int. Symp. on Electron and Photon Interactions at High Energies, Cornell, 1971, Ithaca, N. Y. Cornell Univ. Pr., 1972.
  3. J. D. Bjorken, Phys. Rev. 179, 1547, 1969.
  4. R. P. Feynman, Phys. Rev. Letters, 23, 1415, 1969.
  5. J. D. Bjorken and E. A. Paschos, Phys. Rev. 185, 1975, 1969.
  6. M. Gell-Mann, Phys. Letters, 8, 214, 1964.
- G. Zweig, CERN Report, CERN TH. 401, 412, 1964.



7. C. H. Llewellyn Smith, Phys. Reports, 3C, 264, 1972.
8. D. J. Gross and C. H. Llewellyn Smith, Nucl. Phys. B14, 337, 1969.
9. J. D. Bjorken and E. A. Paschos, Phys. Rev. D1, 3151, 1970.
10. J. Kuti, Talk presented at the IIInd Int. Conf. on Polarized Targets, Berkeley, 1971.
11. L. Gálfi, P. Gnädig, J. Kuti, F. Niedermayer and A. Patkós, Acta Phys. Hung., 31, 85, 1972.
12. C. G. Callan and D. J. Gross, Phys. Rev. Letters, 22, 156, 1969.
13. R. P. Feynman, Photon-Hadron Interactions N. Y., W. A. Benjamin, 1972.
14. P. Gnädig and F. Niedermayer, Nucl. Phys. B55, 612, 1973.
15. J. D. Bjorken, Phys. Rev. Letters 16, 408, 1966.
16. O. Nachtmann, J. de Phys. 32, 99, 1971; Nucl. Phys. B38, 397, 1972; Phys. Rev. D5, 686, 1972.
17. M. G. Doncel and E. de Rafael Nuovo Cimento, 4A, 363, 1971.
18. F. A. Nezrick, Proceedings of the Neutrino'75 Conference Balatonfüred, I. 32. old.
19. J. Steinberger, Proceedings of the Neutrino'75 Conference Balatonfüred, II. 134. old.
20. H. Fritzsch and M. Gell-Mann, Proc. of Int. Conf. on Duality and Symmetry in Hadron Physics, Tel Aviv, 1971.
21. J. D. Bjorken, Phys. Rev. 148, 1467, 1966.
22. R. P. Feynman, Proc. of Neutrino'72 Conference Balatonfüred.
23. J. Cleyrmans and R. Rodenberg, Phys. Rev. D9, 155, 1974.
24. P. Hasenfratz, Phys. Letters B47, 60, 1973.
25. F. Niedermayer, Nucl. Phys. B79, 355, 1974.
26. G. R. Farrar and J. L. Rosner, Phys. Rev. D7, 2747, 1973.
27. R. N. Cahn and E. W. Colglazier, SLAC-PUB-1267, 1973.
28. C. J. Bebek et al., Phys. Rev. Letters, 30, 624, 1973.
29. C. J. Bebek et al., Int. Symp. on Electron and Photon Interactions at High Energies, Bonn, 1973.
30. J. T. Dakin et al., SLAC-PUB-1269, 1973.
31. J. T. Dakin et al., Int. Symp. on Electron and Photon Interactions at High Energies, Bonn, 1973.
32. G. Preparata and N. S. Craigie, CERN-PUB, TH-2038.
33. F. E. Low, Phys. Rev. D12, 163, 1975.
34. A. Chodos, R. Jaffe, K. Johnson, C. Thorn and V. Weisskopf, Phys. Rev. D9, 3471, 1974; Phys. Rev. D10, 2599, 1974.
35. P. Gnädig, P. Hasenfratz, J. Kuti and A. S. Szalay, KFKI-preprint-75-64.
36. M. Gronau, F. Ravndal, Y. Zarmi, Nucl. Phys. B51, 611, 1973.
37. H. J. Lipkin and M. Peshkin, Phys. Rev. Letters 28, 862, 1972.
38. W. A. Bardeen, M. S. Chanowitz, S. D. Drell, N. Weinstein and T. M. Yan, Phys. Rev. D11, 1094, 1975.
39. J. Schwinger, Phys. Rev. 82, 664, 1951.
40. Kuti Gyula, Kandidátusi disszertáció, 1971.
41. Gnädig Péter, Egyetemi doktori disszertáció, Magyar Fizikai Folyóirat XII/6, 1974.
42. F. Csikor, I. Montvay and F. Niedermayer, Phys. Letters 49B, 47, 1974.
43. BBCDHSSTTVW Collaboration, Production of  $\gamma$  quanta in  $\pi^-N$  interactions at 40 GeV/c, KFKI preprint, 1973.
44. L. Foa, Journ. de Phys. C1—317, 1973.
45. S. Mandelstam, Phys. Letters 13C, 261, 1974.
46. International Seminar on Quark Confinement, Phys. Repts. 23C, 1976.
47. P. Gnädig, P. Hasenfratz, J. Kuti and A. S. Szalay, Contribution to the XVIII. Int. Conf. on High Energy Physics, Tbilisi, 1976.
48. R. Barbieri, R. Gatto, R. Kögeler and Z. Kunszt, Nucl. Phys. B105, 125, 1976.
49. V. G. Bagrov, D. M. Gitman, S. M. Svárcman, ZsETF 68, 392, 1975.
50. J. Kuti and V. Weisskopf, Phys. Rev. D4, 3418, 1974.
51. A. Arneodo and G. Plant, Nucl. Phys. B107, 262, 1976.
52. R. C. Hwa, Phys. Rev. D13, 2607, 1976.

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Sándor István

A kézirat beérkezett: 1979. I. 12. — Terjedelem: 11,55 (A/5) ív

79-213 — Szegedi Nyomda — Felelős vezető: Dobó József igazgató





## TARTALOMJEGYZÉK

### TARTALOM

<i>Jánossy Mihály: Jánossy Lajos, a fizikus és az ember</i> .....	77
<i>Gyulai Zoltán emlékére, 90. születésnapja alkalmából tartott tudományos ülésen elhangzott előadások:</i>	
<i>Barna Árpád, Barna B. Péter, Radnóczy György, Tóth Lajos: Vékonyrétegek kristályainak növekedése idegen anyagok atomjainak jelenlétében</i> .....	83
<i>Görög T., Lendvay Ö.: GaAsP tűkristályok növekedése gőzfázisból</i> .....	97
<i>Hartmann Ervin: Alkalihalogenid kristályok növekedési formáinak stabilitása</i> .....	103
<i>Malicskó László: Megfigyelések a lavinaszerű kristályképződéssel kapcsolatban</i> .....	109
<i>Morlin Zoltán: Kísérletek szilárdfázisú növekedési folyamatok köréből</i> .....	119
<i>Paitz József és Zsoldos Lehelné: Oxidkristályok növesztése és röntgentopográfia</i> .....	143
<i>Tóth András és Sárközi József: Mozgó diszlokációk és ponthibák kölcsönhatásának vizsgálata ionkristályok plasztikus deformációjánál fellépő effektusok mérésével</i> .....	161
<i>Niedermayer Ferenc: Hadronok nagyenergiás szerkezete</i> .....	169



307.226

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

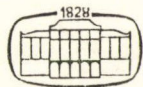
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR  
ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
PÁL LÉNÁRD

XXVII. KÖTET

3. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1979

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10-10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetemi tanár

Biofizikai Intézet

1444 Budapest VIII. Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 72 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölnék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# ÁTMENETI ÉS NEMESFÉMEK KOHÉZIÓS ÉS RUGALMAS TULAJDONSÁGAI

KOLLÁR JÁNOS

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

## TARTALOMJEGYZÉK

Bevezetés .....	209
Irodalmi áttekintés .....	214
I. RÉSZ	
A teljes energia kifejezése egyszerű, átmeneti és nemesfémek esetében .....	221
1. Egyszerű fémek .....	222
2. Átmeneti és nemesfémek .....	227
II. RÉSZ	
Átmeneti fémek	
1. Kohéziós paraméterek rendszámfüggése .....	230
a) A d-sáv energiája .....	230
b) Az s-sáv energiája .....	234
c) Atomí térfogát .....	236
d) Kohéziós energia .....	237
e) Kompresszibilitás .....	240
2. A konfiguráció szerepe a kohéziós és rugalmas tulajdonságokban. 3d és 4d sorozat .....	242
III. RÉSZ	
Nemesfémek	
1. A réz kohéziós tulajdonságai .....	257
a) Alapfeltevések .....	258
b) A közel- szabad s elektronok energiája .....	260
c) A d energia .....	261
d) Numerikus eredmények .....	263
2. Paraméteres modell a nemesfémek kohéziós és rugalmas tulajdonságainak meghatá- rozására .....	271
Köszönetnyilvánítás .....	275
FÜGGELÉK	
Közelítő analitikus hullámfüggvények a 3d átmeneti fémekre .....	276
1. Közelítő hullámfüggvények az s és p pályákra .....	276
2. Közelítő 3d hullámfüggvények. Illesztés a Hartree—Fock pályákhoz .....	278
3. Közelítő 3d hullámfüggvények a vascsoport atomjaira és ionjaira. Variációs eljárás .....	279
Irodalom .....	285

## Bevezetés

A szilárd anyag kohéziós tulajdonságainak vizsgálata a szilárdtestfizika egyik legalapvetőbb feladata. A probléma megoldása abban áll, hogy meghatározzuk a kristály teljes energiáját az egyes atomok helyzetének függvényében, minthogy ennek ismeretében már egyszerűen meghatározható az egy atomra jutó térfogat (kristályos

\*Érkezett 1977. szeptember 22-én.



szilárd testek esetén a rácsállandó), ill. az anyag rugalmas tulajdonságait meghatározó mennyiségek (kompresszibilitás, rugalmas állandók).

Egy szilárd anyag teljes energiájának a meghatározásánál az anyag atomjainak (ismertnek feltételezett) tulajdonságaiból indulunk ki. Elemek esetében természetesen minden atomi paraméter — szigorúan véve — visszavezethető volna egyetlen mennyiségre: ebben az esetben csak az elem  $z$  rendszáma lépne fel paraméterként. Általában azonban nemcsak az adott elem  $z$  töltésű magját tekintjük változatlanoknak, mikor atomjaiból felépítjük a szilárd testet, hanem a mag közelében levő belső elektronok hullámfüggvényeit is. Így a belső elektronpályákat jellemző paraméterek szintén megjelennek az anyag teljes energiájának kifejezésében.

Egy anyag teljes energiájának meghatározása annál egyszerűbb, minél több elektronját írhatjuk le atomi hullámfüggvényekkel (azaz minél kevesebb elektron vesz részt a fémes kötésben). A teljes energia kiszámításánál tehát célszerű szétválasztanunk a törzs- és vezetési elektronokat. Egy elektron akkor tekinthető törzselektronnak, azaz akkor írható le jó közelítésben atomi hullámfüggvénnyel, ha a megfelelő atomi pálya sugara jóval kisebb, mint az anyag Wigner—Seitz sugara (az atomi térfogattal egyező térfogatú gömb sugara).

Az egyszerű fémek esetében a teljes energiát viszonylag „egyszerűen” számíthatjuk ki, mivel az elektronoknak egy jól elkülöníthető csoportját atomi elektronokként kezelhetjük. Vegyük példaként a káliumot. A kálium rendszáma 19, elektron-szerkezete  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s$ . A 4s elektron kivételével az összes elektront atominak tekinthetjük, mivel a  $K^+$  ion sugara (2.5 a. u.) jóval kisebb, mint a Wigner—Seitz sugár (4.96 a. u.), így a kálium-fémbe az  $1s^2 \dots 3p^6$  elektronok alkotják az ion-törzseket, melyek között az átfedés elhanyagolható.

Az egyszerű fémek teljes energiájának meghatározására — éppen a fentiek következtében — kiválóan alkalmas a pszeudopotenciál módszer, melynek segítségével már a legelső közelítésben is konzisztens, fizikai leírás adható az egyszerű fémek rugalmas és szerkezeti sajátosságaira. Ebben az esetben a teljes energia kifejezésében a kötési elektronok  $z$  számán kívül csak a pszeudopotenciálban fellépő állandók (pl. az ion-törzs  $R_c$  sugara) lép fel paraméterként. A pszeudopotenciál módszer tehát lehetővé teszi az egyszerű fémek kohéziójának *egységes* tárgyalását. Az átmeneti és nemesfémek esetében ugyanakkor nem ismerünk ilyen általánosan elfogadott módszert a teljes energia térfogatfüggésének kiszámítására. Ezeknél a fémeknél a problémát a d elektronok jelenléte okozza, melyek egyrészt nem tekinthetők atomi elektronoknak, — azaz részt vesznek a fémes kötés kialakításában — ugyanakkor mégis alapvetően különböznek az egyszerű fémek vezetési elektronjaitól. További nehézséget jelent a d elektronok nagy száma, melynek következtében a nehezen számolható elektron-elektron kölcsönhatások szerepe megnő a kohéziós tulajdonságok kialakításában. A réz esetében például a 3d és 4s elektronokat (11 elektron) — melyek közül 10 elektron az egyszerű fémek közel-szabad elektron képétől erősen eltérő viselkedést mutat — egyaránt figyelembe kell vennünk a teljes energia meghatározásánál.

A dolgozatban a 3d és 4d átmeneti fém-sorozat elemeinek, valamint a nemesfémeknek a kohéziós és rugalmas tulajdonságait vizsgáljuk. Az átmeneti fémek kohéziós és rugalmas jellemzőit a dolgozat II. részében tárgyaljuk. Itt az első fejezetben a kohéziós állandók rendszámfüggésével foglalkozunk. Ebben a fejezetben célunk nem egy meghatározott átmeneti fém tanulmányozása, hanem az egész sorozatra



érvényes tendenciák vizsgálata. A számítás nemcsak a kohéziós energiára ad a tapasztalattal összhangban levő eredményeket, hanem a Wigner—Seitz-sugár rendszám-függésére is a kísérleteknek megfelelő eredményt kapunk. Bár a módszer a kompresszibilitás jellegzetes rendszám-függését is helyesen adja vissza egy sorozaton belül, az egyes elemekre számolt értékek azonban általában jóval nagyobbak a kísérleti értékeknél.

A számításnál használt modell a szorosan kötött  $d$  elektronok, valamint a közel-szabad  $s$  elektronok sávenergiáját veszi figyelembe. Ez az eljárás lényegében a „tight binding-nearly-free elektron” (szorosan kötött és közel-szabad elektronok, röviden TB-NFE) közelítés egyszerűsített változatának tekinthető, melyben a hibridizációs tagokat teljesen elhanyagoljuk. Célunk egy olyan egyszerű modell alkalmazása volt, amely a fizikai képnek csak a legfontosabb jellemzőit veszi figyelembe, ugyanakkor azonban még tartalmazza a kohéziós jellemzők szempontjából lényeges fizikai tulajdonságokat. Ennek megfelelően a sorozaton belül minden elemre hasonló (lapcentrált köbös) szerkezetet tételeztünk fel, melyet az indokol, hogy adott atomi térfogat esetén a különböző szerkezetek közötti energiakülönbség elhanyagolható a kohéziós energia értékéhez képest. Ugyanúgy elhanyagoltuk a  $d$ -sávok felhasadását a hullám-szám-térben, valamint minden mágnességgel kapcsolatos energiajárulékot. Ilyen vagy hasonló közelítések egy egész sorozat vizsgálatánál nyilvánvalóan szükségesek.

A dolgozat II./1. fejezetében alkalmazott modell néhány további közelítést is tartalmaz. Ezek közül a legfontosabb a teljes energia  $d$ -részének Hückel-módszerrel történő meghatározása, azaz modellünkben a teljes energia  $d$ -részét a  $d$  egyelektron-energiák összegével azonosítottuk ( $d$  sávenergia). Az így elhanyagolt tagok szerepe különösen a kompresszibilitás, ill. a rugalmas állandók meghatározásánál jelentős. Ez az atomok közötti  $d$ — $d$  kölcsönhatás leírására használt Born—Mayer-potenciál alakjából is látható, amely egyre növekvő járulékot ad az energia magasabb deriváltjaiban exponenciális térfogathatás következtében. A fenti elektron-elektron kölcsönhatások elhanyagolása különösen a *nemesfémek* esetében vezet jelentős hibához: hatásukat a dolgozat harmadik részében vizsgáljuk. A kohéziós tulajdonságok jellegzetes *rendszámfüggését* azonban ezeknek a tagoknak a figyelembevétele nélkül is magyarázhatjuk.

A kohéziós paraméterek rendszámfüggésében mutatkozó jellegzetes tendenciák reprodukálásán kívül a dolgozat II./1. fejezetének egyik további eredménye, hogy a kohéziós energia és az atomi térfogat szélsőértékeit — a tapasztalattal jó egyezésben — a sorozat *különböző* elemeinél kaptuk. A *merev-sáv modell* alkalmazása esetén ezeket a szélsőértékeket *azonos* helyen kapnánk (a  $3d$  átmeneti fém-sorozatban a krómnál). A kohéziós energia és az atomi térfogat szélsőérték-helyeinek a kísérletekben tapasztalt eltérését azáltal tudtuk megmagyarázni, hogy modellünkben a  *$d$  sáv szélesség* meghatározott módon *függ a rendszámtól*.

A második rész 2. fejezetében a konfiguráció szerepét vizsgáljuk a  $3d$  és  $4d$  sorozat elemeinek kohéziós és rugalmas tulajdonságaiban. A teljes energia előző fejezetben használt kifejezését tovább fejlesztve az  $s$  energiajárulékot most a perturbációszámítás magasabb rendjében határoztuk meg; a  $d$  energia-részt most is a TB-sáv-energiával közelítettük. Az  $s$  energia-részben, a potenciál perturbációs sorában mind az első, mind a másodrendű tagban szereplő paramétereket az *ion-sugárral arányosnak* tételeztük fel, és azt tapasztaltuk, hogy — a kohéziós állandók szempontjából optimalisan megválasztott — arányossági tényezők értéke *közel azonos* a vizsgált fémek



esetében. Ez az eredmény lehetővé tette egy *univerzális* arányossági tényező bevezetését, melynek felhasználásával tehát az *ion-sugár* már *meghatározza* a potenciál paramétereinek értékét.

A különböző konfigurációjú állapotok vizsgálata során a kohéziós és rugalmas állandókra kapott eredményeink azt mutatják, hogy modellünk a *maximális* kémiai *vegyértéknek* megfelelő (vagy közel egyenlő) számú közel-szabad elektron feltételezésével adja vissza legjobban a megfigyelt értékeket. Ez a sorozatok elején levő fémeknél (mivel itt a maximális vegyérték egyenlő az s és d elektronok számának összegével) azt jelenti, hogy ezeket a fémeket a kohéziós és rugalmas tulajdonságok meghatározásánál jó közelítéssel *egyszerű fémként* kezelhetjük.

A dolgozat *harmadik részében* a *nemesfémek* kohéziós és rugalmas tulajdonságait vizsgáljuk. Ebben az esetben a d sávénergia-járulék, amely az átmeneti fémek kohéziós paramétereinek jellegzetes rendszámfüggését okozza, éppen eltűnik. A dolgozat II. részében használt modell tehát *kiegészítésre* szorul, mivel a d sávénergia eltűnése miatt az eddig elhanyagolt energiatagok kerülnek előtérbe. Ezenkívül a nemesfémek zárt d héjai közötti kölcsönhatás is — amelynek döntő jelentősége van a nemesfémek kohéziós tulajdonságainak meghatározásában — új kölcsönhatásként jelentkezik.

A III./1 fejezetben, a réz teljes energiája térfogatfüggésének meghatározásánál csak az *explicit* térfogatfüggő tagokat vettük figyelembe, a szerkezettől függő tagokat elhanyagoltuk. Ezeknek a szerepe nem jelentős a vizsgált tulajdonságok meghatározásánál. Modellünk *két paramétert* tartalmaz. Egyik paraméterünk az *elektrontörzs sugara*, amelyet ebben az esetben réz-ion 3s pályájának a kiterjedése határoz meg. Ez a sugár — az egyszerű fémek esetéhez hasonlóan — kapcsolatban van azzal a térfogattal, amelyen belül a közel-szabad elektronokat leíró ortogonalizált síkhullámokat (orthogonalized plane waves, ezután OPW) már az atomi jellegű belső pályák határozzák meg. A modell másik paramétere a zárt d héjak közötti kicserélődési taszítást leíró tag *amplitúdója*. Ennek az utóbbi tagnak a *térfogat függését* a d héjak közötti átfedés segítségével számítottuk ki. A fenti két paramétert úgy határoztuk meg, hogy az *atomai térfogat* és a *térfogati modulus* (reciprok-kompresszibilitás) számított értékeit illesztettük az egyensúlyi kísérleti adatokhoz. Az így meghatározott paraméterek felhasználásával számításunk nemcsak a *kohéziós energiára* és a térfogati modulus deriváltjának értékére ad a kísérletekkel összhangban levő eredményeket, hanem az *állapotegyenletre* is a  $T=0$  K-ra extrapolált kísérleti értékeknek megfelelő eredményeket kapunk (közel 6 Mbar-ig.)

Az s és d energia-járulékokra kapott eredményeink ugyanakkor *lényegesen különböznek* az előző, paraméteres számítások eredményeitől. Ezekben a számításokban ugyanis az egyszerű fémekhez hasonló s energia-kifejezéshez — a réz megfelelő „keménységének” biztosítása érdekében — egy *taszító* d elektron-járulékot adnak hozzá. Ennek következtében a megfigyelt egyensúlyi atomi sugarat csak az s energia-rész erős *eltorzításával* lehet elérni (az „ab initio” számítások szerint ugyanis az s energia-görbe minimuma a megfigyelt egyensúlyi atomi sugár közelébe esik). *Ezzel ellentétben* számításunkban — az egyensúlyi atomi sugár kísérleti értékének reprodukálása mellett — az s energia-rész közelítően *megegyezik* az „ab initio” eredményekkel, a d héjak közötti kölcsönhatásra pedig egy *vonzó* járulékot kaptunk, amely csak kisebb atomi sugarak esetén válik taszítóvá. A d elektron-energia — a fenti tulajdonságok mellett — az előző, taszító d-járulékot tartalmazó leíráshoz hasonlóan jelentős mértékben *megnöveli* a térfogati modulus értékét. A számítás további eredménye, hogy



sikerült megőriznünk az  $s$  energia-részben szereplő paraméter fizikai jelentését a réz esetében is (az egyszerű fémeknél az „Ashcroft sugár” és az ion-törzs sugarának kapcsolata közismert). Ezt mutatja a rács egyensúlyi adataiból meghatározott paraméter-érték jó egyezése az iontörzs sugarára vonatkozó atomfizikai számítás eredményével. A fejezet további részében a réz energia-szintjeinek helyzetével, ill. ezek térfogatfüggésével foglalkozunk.

A rézre elvégzett számításaink eredményei tehát azt mutatják, hogy a nemesfémek teljes energiáját meghatározó paraméteres számításokban általában *tasztító* energia taggal (pl. Born—Mayer potenciál) leírt  $d$  energia, a  $d$  elektronok hatásának csak *egy részét* veszi figyelembe, a teljes  $d$  járulék ennél összetettebb viselkedést mutat. Ezért indokoltnak látszik a nemesfémek  $d$  energia-részének leírására egy *új paraméteres kifejezés* bevezetése, amely rendelkezik a fent tárgyalt tulajdonságokkal. A dolgozat harmadik részének második fejezetében egy ilyen analitikus alakú, két-paraméteres kifejezést javasolunk, melynek segítségével meghatározzuk a nemesfémek kohéziós energiáját, a térfogati modulusok nyomás szerinti deriváltját, valamint a rugalmas állandókat. A kohéziós energiák értékeire réz és ezüst esetén kielégítő eredményeket kaptunk, míg az aragnál számításaink eredménye kevésbé jól egyezik a megfigyelt értékkel. A nyírási rugalmas állandókat úgy határoztuk meg, hogy a teljes  $d$  energia-járulékot *párerők összegének* tételeztük fel. Az így kapott eredményeinket értékelve megállapíthatjuk, hogy a számított értékek réz és ezüst esetén nincsenek ellentétben a rugalmas állandó mérések eredményeivel, míg az arany esetében arra következtethetünk, hogy itt a  $d$  energia-járulék *csak pár-kölcsönhatások* feltételezésével *nem állítható elő*.

A fenti számítások elvégzéséhez atomi hullámfüggvényekre volt szükségünk. Ezeknek a hullámfüggvényeknek egyszerű, analitikus alakban történő meghatározását a  $3d$  átmeneti fémsorozat atomjaira és ionjaira a dolgozat függeléke tartalmazza. Az egyszerű, analitikus forma használatát a számítások bonyolultsága indokolja. Ugyanakkor azonban — mivel a legtöbb molekula- és szilárdtestfizikai számításban a kötő-elektronok hullámfüggvényeit atomi hullámfüggvényekből építjük fel — szükséges, hogy ezek az atomi hullámfüggvények elég „rugalmasak” legyenek. Ezt biztosítja az analitikus forma, amelynek paramétereit — a függvény-alak megőrzése mellett — az új rendszerben újra meghatározhatjuk variációs módszer segítségével.

A függelék első részében a  $3d$  átmeneti fém-sorozat atomjaira készítettünk analitikus hullámfüggvényeket. Az iontörzs elektronjainak hullámfüggvényeit egy polinóm és egy exponenciális függvény szorzataként állítottuk elő, ahol a polinóm együtthatóit úgy határoztuk meg, hogy a hullámfüggvény az azonos szimmetriájú belső pályákra ortogonális legyen. A  $3d$  hullámfüggvényeket két exponenciális függvény összegével közelítettük, melyeknek paramétereit úgy rögzítettük, hogy a függvény illeszkedjen az atomi Hartree—Fock hullámfüggvényhez. Az illesztési eljárásnál arra törekedtünk, hogy hullámfüggvényeink különösen a magtól nagy távolságra közelítsék jól a Hartree—Fock hullámfüggvényeket, mivel az atomok átfedésénél ez a tartomány a legjelentősebb.

A függelék második részében a  $3d$  sorozat atomjaira és ionjaira készítettünk hasonló alakú analitikus hullámfüggvényeket, melyeknek paramétereit most Hartree—Fock variációs eljárással határoztuk meg.

A dolgozat felépítése tehát a következő:

Először irodalmi áttekintést adunk az egyszerű, valamint az átmeneti és nemesfémek teljes energiájának számításáról.



Az első részben az alkalmazott modellben meghatározzuk a teljes energia kifejezését egyszerű, átmeneti és nemesfémek esetében.

A második rész az átmeneti fémek kohéziós és rugalmas tulajdonságait vizsgálja [1], [2], [3], [4], [5], [6]. Az első fejezetben a kohéziós energia, az atomi térfogat és a kompresszibilitás kísérleti értékeinek jellegzetes rendszámfüggését magyarázzuk a „tight binding” (TB) közelítés felhasználásával. A második fejezetben a konfiguráció szerepét vizsgáljuk a 3d és 4d sorozat elemeinek kohéziós és rugalmas tulajdonságaiban.

A harmadik részben a nemesfémek kohéziós jellemzőit vizsgáljuk [7], [8], [9]. Az első fejezetben a réz térfogatfüggő teljes energiáját határozzuk meg és az ezzel kapcsolatos tulajdonságokat tárgyaljuk. A második fejezetben új paraméteres kifejezést adunk a nemesfémek d energijárulékának leírására és a rugalmas állandók kiszámítása kapcsán taglaljuk a párerő-feltételezés jogosságát a rugalmas állandók d-járulékának meghatározásánál.

A Függelék a felhasznált közelítő hullámfüggvényeket tartalmazza, amelyeket a 3d átmeneti fém sorozat atomjaira és ionjaira dolgoztunk ki [10], [11], [12].

### Irodalmi áttekintés

A fémek kohéziós tulajdonságainak kvantummechanikai vizsgálata a harmincas évek elején kezdődött. Az alkáli fémek kohéziós energiájára Wigner és Seitz módszerének [13] felhasználásával először Fuchs [14], Frölich [15] majd Bardeen [16] végzett sikeres számításokat. Ezeknek a munkáknak alapvető jelentőségük van a kohéziós energiaszámítások történetében; lényeges közelítéseiket (pl. semleges gömb modell) a további munkák is alkalmazzák. Itt Fuchs [14] munkájára kell részletesebben kitérnünk.

Fuchs számítása a Wigner—Seitz módszeren alapszik. Ebben a módszerben a rácsot „elemi poliéderekre” osztják, melyek mindegyike egy iont vesz körül. Ezeknek a poliédereknek a határán — a periodicitás következtében — a vezetési elektronok egész kristályra kiterjedő hullámfüggvényei meghatározott határfeltételeknek tesznek eleget. Így a legalacsonyabb energiájú vezetési elektron-állapot meghatározásánál minden poliéder belsejében a

$$-\nabla^2 \Phi_0 + (V - E) \Phi_0 = 0$$

Schrödinger-egyenletet kell megoldanunk a  $\partial \Phi_0 / \partial n = 0$  határfeltétel figyelembevételével ( $V$  az ion potenciálja,  $\partial / \partial n$  pedig a poliéder felületére merőleges, „normális” irányú deriváltat jelent). Az atomi poliédereket — különösen szoros illeszkedésű szerkezetek esetén — jó közelítéssel gömböknek tekinthetjük, amelyek térfogata

( $\Omega_0 = \frac{4\pi}{3} R_a^3$ , ahol  $R_a$  a Wigner—Seitz vagy atomi sugár) egyenlő az atomi poliéder térfogatával. Fuchs a kristály teljes energiáját ennek a módszernek a segítségével határozta meg. Az egyvegyértékű fémek teljes energiáját négy részre bontotta:

- a)  $E^{(0)}$  a legalacsonyabban fekvő vezetési elektron-állapot energiája, melyet a fenti módszerrel, a Schrödinger-egyenlet numerikus integrálásával határozott meg a  $\partial \Phi_0 / \partial n = 0$  határfeltétel figyelembevételével.



- b)  $E^{(L)}$  rácsenergia, melyet az  $E_M - E_g$  különbségként állított elő. Itt az  $E_M$  (Madelung) mennyiség a homogén negatív háttérbe ágyazott  $+e$  töltésekből álló rács energiája, melyet Ewald módszerével határozott meg,  $E_g$  pedig egy homogén,  $\Omega_0$  térfogatú negatív töltéeloszlás energiája középpontjában  $+e$  töltéssel. Ez az energiarész általában kicsi, szerepe csak a nyírási rugalmas állandók meghatározásánál jelentős.
- c)  $E^{(F)}$  Fermi-energia, amely szabad elektron közelítésben  $3/5 \varepsilon_F$ -el egyenlő (Sommerfeld-formula, itt  $\varepsilon_F$  a Fermi-nívó).
- d)  $E^{(I)}$  az ionok zárt héjai közötti kicserélődési energia.

A tisztán térfogattól függő mennyiségeket (teljes energia, atomi sugár, kompresszibilitás) elsősorban  $E^{(0)}$  és  $E^{(F)}$  határozzák meg. A nyírási rugalmas állandókhoz azonban ezek a tagok nem adnak járulékot, mivel — különösen egyvegyértékű fémek esetén — jó közelítéssel csak a térfogattól függenek, azaz a térfogatot megtartó homogén deformációknál nem változnak. A fenti leírásból láthatóan hiányzik a vezetési elektronok közötti kölcsönhatás; egyvegyértékű fémek esetében azonban a Coulomb, kicserélődési és korrelációs energia együttes járuléka a teljes energiához a kérdéses  $R_a$  tartományában valóban közelítőleg nulla.

Fuchs a fenti módszer alapján meghatározta az alkáli fémek rugalmas állandóit és a kísérleti értékekkel összhangban levő eredményeket kapott.

A fenti módszerben tehát  $E^{(0)}$  meghatározásához a Schrödinger-egyenlet numerikus integrálása szükséges. Fröchlich [15] mutatta meg, hogy egyvegyértékű fémek esetén a sáv aljának térfogat-függését jól közelíthetjük a minimum környezetében a következő kifejezéssel:

$$E^{(0)} \approx -\frac{3}{R_a} + \frac{r_0^2}{R_a^3},$$

ahol  $r_0$  meghatározandó paraméter (a fenti kifejezés minimuma  $R_a = r_0$ -nál van). Alkáli fémek esetén a fenti kifejezés valóban jól közelíti a Schrödinger-egyenlet numerikus integrálásával kapott eredményt.

Kleinman [17] mutatott rá arra, hogy az OPW módszer — a Wigner—Seitz-módszerhez hasonlóan — eredményesen alkalmazható a fémek kötés tárgyalására. Számításait a három vezetési elektronnal rendelkező alumíniumra végezte el, ahol már az elektron-elektron kölcsönhatás is jelentős szerepet kap a fémek kötés kialakításában. Az atomi sugár, a teljes energia és a térfogati modulus értékeire egyaránt kielégítő eredményeket kapott. Az OPW leírás alapelveit (ortogonalitási lyuk korrekció) használják fel Raich és Good, valamint Cutler [18] munkái is.

Gombás, majd Gáspár [19] az atom statisztikus elméletének felhasználásával vizsgálta az egyszerű fémek kohéziós tulajdonságait. Gombás az alkáli földfémek, Gáspár pedig a háromvegyértékű alumínium esetében mutatta meg, hogy a statisztikus modell jól alkalmazható az egyszerű fémek kohéziós jellemzőinek vizsgálatára; számításaik a teljes energia, az atomi sugár és a kompresszibilitás értékeire egyaránt jó eredményeket adtak.

Jelenleg az egyszerű fémek teljes energiájának legegyszerűbb, jól áttekinthető leírását a pseudopotenciál módszer adja [20]—[26]. Ebben a módszerben a teljes energiát a pseudopotenciál perturbációs sorának segítségével állítják elő, így a teljes energia kifejezése a következő alakú lesz:

$$E = E_M + E_0 + E_1 + E_2 + E_3 + \dots$$



Itt  $E_M$  a Madelung energia, a homogén negatív háttérbe ágyazott ionrács energiája,  $E_0$  a semlegesítő pozitív háttérben a homogén elektrongáz energiája, azaz a kinetikus, kicserélődési és korrelációs energia összege,  $E_n$  pedig a peszudopotenciál perturbációs sorában a potenciál  $n$ -edik hatványát tartalmazó tagot jelenti. Az elsőrendű tag a pszeudopotenciál átlagát tartalmazza, alkáli fémek esetén már ez a közelítés is viszonylag jó eredményeket ad a kohéziós paraméterekre. Nagyobb vegyértékek esetén további tagok figyelembevétele szükséges. Míg az elsőrendű tag *csak* az atomi térfogattól függ, a másod- és magasabb rendű tagok függenek a kristályszerkezettől is. A másodrendű taggal párkölcsönhatásokat, a magasabb rendű tagokkal pedig a többtesterők hatását vehetjük figyelembe, melyek szerepe nagy vegyértékek esetén mind a kohéziós, mind a rugalmas állandók meghatározásánál jelentős lehet [27], [25].

A fenti módszert alkalmazta *Ashcroft és Langreth* [20], akik a perturbációszámítás másodrendjében meghatározták számos egyszerű fém teljes energiáját és térfogati modulusát. Számításukban egy egyparaméteres, rendkívül egyszerű alakú potenciált, az ún. „Ashcroft” potenciált használták, amely egy  $r_c$  sugarú gömbön belül nulla,

azon kívül  $-\frac{ze^2}{r}$  alakú. Itt  $z$  a vegyérték,  $r_c$  pedig az ion-törzs sugarával hozható összefüggésbe. Eredményeik mind a teljes energia, mind a térfogati modulus esetében összhangban voltak a kísérleti értékekkel.

*Brovman, Kagan és Holas* [24], [25] további tagokat is figyelembe vettek a pszeudopotenciál perturbációs sorában. Számításukban egy kétparaméteres potenciált használtak, melynek alakja a következő: az ion-törzs belsejében állandó, azon kívül pedig Coulomb-szerű. A paraméterek értékeit az atomi sugár és az egyik nyírási rugalmas állandó ( $C_{44}$ ) reprodukálása útján, illesztéssel határozták meg. A nátriumra, káliumra és magnéziumra elvégzett számításaik eredményei, melyek jó egyezésben voltak a kísérleti értékekkel, azt mutatták, hogy a harmadrendű tag járuléka nagyságrendben általában megegyeznek a másodrendű tagéval, szerepük így már a kétvegyértékű magnézium esetében sem elhanyagolható. Megjegyezzük azonban, hogy a magasabb rendű tagok járuléka erősen függ a pszeudopotenciál konkrét alakjától [27].

Az utóbbi években a „kiegészített síkhullámok” (ezután APW) módszerét is eredményesen használják az egyszerű fémek teljes energiájának kiszámítására. Ezekben a számításokban az egy-elektron energiák összegét APW-módszer segítségével határozzák meg, az elektron-elektron kölcsönhatást pedig általában az ún.  $q^{1/3}$ -os közelítés segítségével határozzák meg (Slater—Gáspár—Kohn—Sham-kicserélődés). Itt az elektron-elektron kölcsönhatás sűrűség-függését a szabad elektron kicserélődési kölcsönhatással megegyező alakúnak tételezik fel, együtthatóját pedig rendszerint illesztéssel határozzák meg. *Ross és Johnson* [28] az összenyomott alumínium sávszerkezetét, valamint teljes energiáját és térfogati modulusát határozták meg a fenti módszer segítségével, kielégítő egyezésben a kísérleti értékekkel.

Végül az egyszerű fémekre vonatkozó munkáknál tárgyaljuk *Johansson és Rosengren* [29] számítását is, akik a ritka földfém sorozat kohéziós tulajdonságait egy „egyszerű fém modellben”, másodrendű pszeudopotenciál számítás segítségével tárgyalták. Pszeudopotenciálként egy két paraméteres modell-potenciált használtak, melynek paramétereit a sorozat néhány eleménél illesztették, majd a többi elemre interpolációval határozták meg. Számításukban nemcsak az atomi sugár, a teljes energia és a térfogati modulus értékeire kaptak a kísérletekkel összhangban levő



eredményeket, hanem a ritka földfémek kristályszerkezetének a sorozaton belül megfigyelhető jellegzetes változását is jól reprodukálták.

Az elmondottakat összefoglalva tehát elmondhatjuk, hogy az egyszerű fémek kohéziós és rugalmas tulajdonságait az ismertett elméleti módszerek (Wigner—Seitz, statisztikus, OPW, APW, pseudopotenciál módszer) kielégítően értelmezik.

Az átmeneti és nemesfémek esetén azonban nem ismerünk általánosan elfogadott módszereket a kohéziós és rugalmas tulajdonságok tárgyalására. Így az egyes elemekre elvégzett „ad hoc” számításokon kívül — melyek pl. a 3d sorozatban a vas [30], [31] és réz [32] esetében ismertek (a réz kohéziójával még számos további munka is foglalkozik) — eddig nem történt meg a kohéziós jellemzők átfogó, egy teljes sorozatra kiterjedő vizsgálata. Csupán a kohéziós energiára, ill. a különböző szerkezetek stabilitásának vizsgálatára ismerünk egy sorozat minden elemére kiterjedő számításokat a „tight binding” [33], [34] a renormált atom [35] vagy a „model Hamiltonian” [36], [37] közelítés felhasználásával.

Az átmeneti fémekre elvégzett számítások közül először Stern [30] munkáját ismertetjük röviden. A vasra elvégzett számítás a TB közelítés egy módosított változatán alapszik. A módosítás lényege a következő: a szokásos, atomi hullámfüggvényekből felépített TB-hullámfüggvényeket ortogonalizálta a törzs-elektron állapotokra, valamint egy polinóm sorfejtés segítségével figyelembe vette a szomszédos atomokról átnyúló töltéssűrűséget is. A számítás eredményei összhangban voltak az atomi sugár, kohéziós energia és térfogati modulus kísérleti értékeivel. Shurtleff és Kleinman [31] az APW-módszer egy általuk módosított változatát használták fel a lapcentrált köbös szerkezetű  $\gamma$ -vas sáv szerkezetének és kötési energiájának a meghatározására. A self-konzisztens számítás azonban — bár az egyelektron spektrumot megfelelő módon reprodukálta — nem adott kohéziót a  $q^{1/3}$ -os elektron-elektron kölcsönhatási tag együtthatójának egyetlen értéke mellett sem.

A következőkben rátérünk egy adott átmeneti fém-sorozaton belül a kohéziós paraméterekben megmutatkozó jellegzetes tendenciákkal foglalkozó munkák ismertetésére. Ha egy adott átmeneti fém-sorozat minden elemére felmérjük az atomi sugár, kohéziós energia és térfogati modulus értékeit, a kohéziós állandók jellegzetes rendszámfüggését figyelhetjük meg [38]. A kohéziós energia és a térfogati modulus maximumot, az atomi sugár pedig minimumot mutat a sorozat középső elemeinél (a 3d sorozatnál az adatok eléggé „szórnak”, ez a tendencia tisztán a 4d és 5d sorozat esetében látszik). Friedel [33] mutatta meg, hogy a kohéziós energia jellegzetes rendszámfüggését már egy  $n_0 = \text{const.}$  állapotossűrűség felhasználásával is magyarázni lehet, ha feltételezzük — a TB-közelítés szellemében —, hogy a d-sáv az atomi d-nívó körül „szélesedik ki”. Így a kohéziós energiát (ha a teljes energiát az egyelektron energiák összegével azonosítjuk) a következő kifejezés adja:

$$E_{\text{coh}} = \int_0^{\varepsilon_F} (\varepsilon_{\text{at}} - \varepsilon) n_0 d\varepsilon = \xi \left( \varepsilon_{\text{at}} - \frac{1}{2n_0} \xi \right),$$

ahol

$$\xi = \int_0^{\varepsilon_F} n_0 d\varepsilon = n_0 \varepsilon_F.$$

Itt  $\varepsilon_F$  a Fermi-nívó,  $\varepsilon_{\text{at}}$  az atomi nívó, amely körül a sáv „kiszélesedik”,  $\xi$  pedig a sávban levő elektronok száma.



*Ducastelle és Cyrot—Lackmann* [34] munkája szintén kvalitatív magyarázatot ad az átmeneti fémek kohéziós energiájának rendszámfüggésére. A d-sávenergiát TB közelítésben határozták meg és feltételezték, hogy csak ez ad lényeges járulékot a kohéziós energiához.

*Watson és Ehrenreich* a „renormált atom” modell [39] segítségével határozták meg a 3d és 4d sorozat elemeinek kohéziós energiáját [35]. Eredményeik megfelelő egyezésben voltak a kísérleti értékekkel. Számításukban megbecsülték az s—d hibridizáció hatását is, és úgy találták, hogy jelentős járulékot ad a kohéziós energiához. Itt jegyezzük meg, hogy az s—d hibridizáció szerepe az átmeneti fémek teljes energiájában távolról sem tisztázott kérdés. Így pl. *Deegan* [37] számításai azt mutatják, hogy az s—d hibridizáció nem játszik lényeges szerepet a d-fémek kohéziós tulajdonságainak kialakításában.

Az átmeneti fémek kristályszerkezete is jellegzetes rendszámfüggést mutat. A sorozatok elején a szoros illeszkedésű hexagonális (hcp), a közepén a tércentrált köbös (bcc) a végén pedig általában a lapcentrált köbös (fcc) szerkezet az uralkodó. *Pettifor* [36] a H-NFE-TB-modell (hibrid közel-szabad elektron-TB) segítségével vizsgálta a különböző kristályszerkezetek stabilitását. Számítása helyesen adta vissza a stabil kristályszerkezetek megfigyelhető rendszámfüggését, bár a sorozat második felében a helyes tendencia reprodukálásához szükség volt az ion-törzsek közötti taszítás figyelembevételére is, melynek feltételezett rendszámfüggése kevésbé indokolható.

Végül megemlíti *Animalu* [40] munkáját, aki a „kvantum defekt” módszert általánosította az átmeneti fémekre, annak segítségével pedig meghatározta egy Abarenkov—Heine-típusú modell-potenciál paramétereit. Az így meghatározott fononspektrumok számos esetben jól közelítették a kísérleti görbét.

A fentieket összefoglalva tehát elmondhatjuk, hogy amíg az egyszerű fémek esetében az elméleti módszerek általában helyesen értelmezik a kohéziós és rugalmas paraméterek mért értékeit, az átmeneti fémeknél számos kérdés még tisztázatlan. Így magyarázatra vár az atomi sugár és térfogati modulus értékeinek jellegzetes változása egy adott sorozaton belül, valamint általában elmondhatjuk, hogy nem megértett az s és d elektronok szerepe az átmeneti fémek kohéziós és rugalmas tulajdonságainak a kialakításában.

A nemesfémek és különösen a réz kohéziójával foglalkozó munkák száma jóval nagyobb. Ezek egyrészt „ab initio” számítások [32], [41]—[48], másrészt paraméteres leírást alkalmaznak [49], [50], ahol a paraméterek értékeit egyensúlyi kohéziós adatokból határozzák meg. *Löwdin* [51] és *Brooks* [43] munkáiban megtalálhatjuk a teljes energia sűrűség-mátrixokkal kifejezett alakját Hartree—Fock közelítésben. A konkrét számítások elvégzéséhez azonban további közelítések szükségesek. Az „ab initio” számítások egyik része a Thomas—Fermi közelítést használja fel a teljes energia meghatározásánál [32], [42], egy másik része pedig sávszerkezet-számítási módszereket alkalmaz [45]—[48], ahol a kicserélődési és korrelációs energiát különböző közelítések segítségével veszik figyelembe [45].

A réz kohéziós tulajdonságait először *Fuchs* [32] vizsgálta a Wigner—Seitz módszer segítségével. A módszer lényegét az egyvegyértékű, egyszerű fémek tárgyalásánál már ismertettük, *Fuchs* a számítást most is hasonló módon végezte el. A legalacsonyabban fekvő vezetési elektron állapot (4s) energiáját a Schrödinger-egyenlet numerikus integrálása útján határozta meg. Feltételezte, hogy a 3d elektronok az



ion-törzshöz tartoznak, azaz a számításnál változatlan atomi 3d hullámfüggvényeket használt. Így meghatározta a teljes energia s elektronoktól származó részét, melynek segítségével kiszámította az atomi sugár, kohéziós energia és kompresszibilitás egyensúlyi értékeit. Az atomi sugár és a kohéziós energia egyensúlyi értékeire kapott eredményei összhangban voltak a kísérleti értékekkel, a réz kompresszibilitására azonban a megfigyelt érték háromszorosát kapta. Ez várható is hiszen a nemesfémek viszonylag kis kompresszibilitása nem reprodukálható a zárt d-héjak közötti kölcsönhatás figyelembevétele nélkül. Fuchs ezért tekintetbe vette a d elektronok hatását is egy módosított Thomas—Fermi-közelítés segítségével, és így a d energiára egy taszító járulékot kapott. Ezután újra meghatározta a kohéziós paraméterek egyensúlyi értékeit. A kompresszibilitásra kapott eredménye most már jól egyezett a mért értékkel, az atomi sugár így meghatározott értéke azonban — a taszító d nyomásjárulék következtében — jóval nagyobbak adódott, mint a megfigyelt érték.

Kambe [41] mind a három nemesfém esetében kiszámította a kohéziós energiákat. Eredményei azonban — különösen az arany esetében — nem jól egyeznek a kísérleti értékekkel.

Gombás korábbi eredményei alapján Ladányi majd később Antal [42] az atom statisztikus elméletének felhasználásával végzett számításokat a nemesfémekre. Ladányi jó eredményeket kapott a kohéziós energiára és az atomi sugarakra, kompresszibilitás értékei viszont jóval nagyobbak voltak a megfigyelt értékeknél. Antal a fenti módszer segítségével a nemesfémek rugalmas állandóit vizsgálta.

A nemesfémek kohéziójával foglalkozó paraméteres számítások Fuchs [32] munkáján alapulnak, a sáv aljának energiáját azonban általában a Frölich [15] által bevezetett, egy paramétert tartalmazó kifejezéssel közelítik, a lezárt d héjak hatását pedig egy *taszító*, rendszerint Born—Mayer-típusú energia taggal veszik figyelembe. A paraméteres leírások közül először Jaswal és Girifalco [49] munkáját említjük meg, akik a réz rugalmas tulajdonságait vizsgálták. Számításukban a teljes energiát a következő alakban vették fel:

$$E = E_0 + E_k + E_{ex} + E_{corr} + E' + 6E_{c-c}.$$

Itt  $E_0$  a legalsó vezetési elektron-nívó energiája,  $E_k$  a kinetikus energia,  $E_{ex}$  és  $E_{corr}$  a kicserélődési, ill. korrelációs energia,  $E'$  a vezetési elektronok közötti Coulomb energia,  $E_{c-c}$  pedig az ion-törzsek közötti kölcsönhatási energia.  $E_0$ -t — Frölich közelítésének megfelelően — az

$$E_0 = -(3/R_a) + (\varrho_0^2/R_a^3)$$

alakban vették fel, ahol  $\varrho_0^2 = 3R_c^2$  illesztendő paraméter. Egyszerű fémek esetén  $R_c$  az ion-törzs kiterjedésére jellemző. A többi energia-tag értékét szabad elektron modellben számították ki. Az ion-törzsek közötti kölcsönhatási energiát Born—Mayer-potenciál segítségével határozták meg:

$$E_{c-c} = \alpha \exp [\varrho(R_0 - R)/R_0].$$

Itt  $\alpha$  és  $\varrho$  meghatározandó paraméterek,  $R_0$  pedig az egyensúlyi legközelebbi szomszéd távolság. Energia-kifejezésük így három paramétert tartalmaz ( $\alpha$ ,  $\varrho$ ,  $\varrho_0^2$ ) melyek



értékét illesztéssel határozták meg. Az illesztésnél a teljes energia, az egyensúlyi atomi sugár és a kompresszibilitás kísérleti értékeit használták fel. Ezután — feltételezve, hogy az ion-törzsek közötti kölcsönhatás párerők összegeként állítható elő és csak a legközelebbi szomszédok közötti kölcsönhatás lényeges — meghatározták a nyírási rugalmas állandókat, valamint a térfogati modulus nyomás szerinti deriváltjának értékét.  $(dB/dP)$  értékére a kísérletekkel összhangban levő eredményt kaptak; a nyírási rugalmas állandókra kapott értékeik is megfelelőnek mondhatók, bár kicsit nagyobbak a mért értékeknél. A modell lényeges hibájának tartjuk azonban, hogy a sáv aljában fellépő  $q_0^2$  paraméter értékére negatív eredményt ad, ami — az egyszerű fémeknél elfogadott értelmezés szerint — imaginárius ion-törzs sugárnak felelne meg. Így az illesztett paramétereknek és az azokat tartalmazó energia tagoknak külön-külön nem tudunk fizikai értelmet adni.

Hasonló módszeren alapszik Hsieh és Bolsaitis [50] számítása, akik a réz, ezüst és arany nyírási rugalmas állandóit, valamint ezek nyomás szerinti deriváltját határozták meg. Számításuk négy paramétert tartalmazott (Jaswal és Girifalco által használt három paraméteren kívül a kinetikus energia kifejezésében is bevezettek egy paramétert), így a teljes energia, atomi sugár és térfogati modulus kísérleti értékei mellett a térfogati modulus nyomás szerinti deriváltjának egyensúlyi értékét is felhasználták az illesztésnél. Számításuk eredménye a réz és ezüst esetében kielégítőnek mondható, míg arany esetén számított értékeik nem egyeznek a nyírási rugalmas állandók és deriváltjaik mért értékeivel. Számításuk Jaswal és Girifalco munkájához hasonlóan — az energiában fellépő  $R_a^{-3}$ -os tag együtthatójára negatív értéket ad réz és arany esetén, míg ezüst esetében ez az érték közelítőleg nulla. Így az egyes energia tagok értelmezése itt is nehézségekbe ütközik.

Végül a réz kohéziós tulajdonságait vizsgáló munkák közül kettőt említünk meg, melyek mindegyike szelf-konzisztens APW-módszert használ [47], [48]. Ezek a munkák közel egyidőben jelentek meg és egymástól függetlenül fródtak. Az elektron-elektron kölcsönhatást mindkét szerző az ún.  $X_\alpha$ -módszer segítségével vette figyelembe, amelyben a  $q^{1/3}$ -os tag együtthatóját a rácsállandó egyensúlyi értékéhez illesztették. Perrot [47] a réz kohéziós energiáját és kompresszibilitását számította ki kitűnő egyezésben a kísérleti értékekkel. Snow [48] a réz állapotegyenletét határozta meg (600 kbar-ig), számításának eredménye szintén jól egyezik a kísérleti görbével.

A nemesfémek kohéziós és rugalmas tulajdonságait tárgyaló irodalom tehát sokkal kiterjedtebb, mint az átmeneti fémek esetében. Az eddigi munkákat összefoglalva megállapíthatjuk, hogy a szelf-konzisztens APW- $X_\alpha$  módszer — legalábbis a réz esetében — jól írja le a térfogattól függő kohéziós tulajdonságokat (pl. kompresszibilitás, állapotegyenlet). A bonyolult numerikus módszereket alkalmazó számítások azonban kevésbé alkalmasak arra, hogy közelebb vigyenek bennünket a probléma szemléletes formában való megértéséhez, pl. az s és d elektronok szerepének tisztázásához és egyes kohéziós jellemzők kialakításában. Ezt, az egyes energia tagokat egyszerű, analitikus kifejezésekkel közelítő paraméteres leírásoktól várnánk el, az eddigi számításoknál azonban az egyes energia tagok értelmezése nehézségekbe ütközött. Nem kielégítően megoldott továbbá — különösen az arany esetében — a rugalmas állandók kísérleti értékeinek értelmezése sem, és ennek kapcsán megválaszolásra vár az a kérdés, hogy csak párerők felhasználásával milyen mértékben vehető figyelembe a d elektronok hatása a nemesfémek rugalmas jellemzőinek meghatározásánál.



## I. RÉSZ

### A teljes energia kifejezése egyszerű, átmeneti és nemesfémek esetében

A teljes energia meghatározásánál induljunk ki egy tetszőleges elektron-ion rendszer Hamilton operátorából (lásd részletesen pl. [52]-ben):

$$H = \frac{1}{N} \sum_L \mathbf{P}_L^2 / 2M + \frac{1}{2N} \sum_{L \neq L'} \frac{z^2 e^2}{|\mathbf{R}_L - \mathbf{R}_{L'}|} + \frac{1}{N} \sum_{L,l} V(\mathbf{R}_L - \mathbf{r}_l) + \frac{1}{N} \sum_l \mathbf{p}_l^2 / 2m + \frac{1}{2N} \sum_{l \neq l'} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_{l'}|}. \quad (\text{I.1})$$

A fenti kifejezésben  $\mathbf{P}_L$ ,  $\mathbf{R}_L$ ,  $M$  az ionok,  $\mathbf{p}_l$ ,  $\mathbf{r}_l$ ,  $m$  pedig az elektronok impulzusa, helyzetvektora és tömege; az ionok száma  $N$ , töltésük  $ze$ ,  $V(|\mathbf{R}_L - \mathbf{r}_l|)$  pedig az  $L$ -dik ion és  $l$ -dik elektron közötti potenciál. A probléma egzakt megoldása — soktestproblémáról lévén szó — nem lehetséges, hiszen már a két elektront tartalmazó hidrogénmolekula sem kezelhető egzaktul. Ezért tehát a konkrét számítások elvégzésénél különböző közelítéseket kell használnunk. Ebben a fejezetben a számításainkban előforduló legfontosabb közelítéseket kívánjuk ismertetni.

Először, mint az egyik legfontosabb közelítést, az ún. adiabatikus közelítést tárgyaljuk. Ez a közelítés teszi lehetővé, hogy az elektron-ion rendszert két lépésben, külön-külön kezeljük. A közelítés jogossága az elektron-ion tömegarány kicsiségével magyarázható, aminek következtében az elektronok jóval „gyorsabban” mozognak a fémekben, mint az ionok. Így egy adott  $\{\mathbf{R}_L\}$  ion-elrendeződése mellett kiszámíthatjuk az elektron-rendszer alapállapot energiáját és ez mint közvetett ion-ion kölcsönhatási potenciál fog szerepelni az ion-rendszer energiájának meghatározásánál. Így az elektronok alapállapot energiájának kiszámítása után meghatározhatjuk az ion-rendszer energiáját is:

$$\left[ \frac{1}{N} \sum_L \mathbf{P}_L^2 / 2M + \tilde{E}(\dots \mathbf{R}_L \dots) \right] \Phi(\dots \mathbf{R}_L \dots) = E \Phi(\dots \mathbf{R}_L \dots). \quad (\text{I.2})$$

Itt  $\Phi$  az ion-rendszer hullámfüggvénye,

$$\tilde{E}(\dots \mathbf{R}_L \dots) = \frac{1}{2N} \sum_{L \neq L'} \frac{z^2 e^2}{|\mathbf{R}_L - \mathbf{R}_{L'}|} + E_{el}(\dots \mathbf{R}_L \dots) \quad (\text{I.3})$$

$E_{el}$  pedig az elektron-rendszer alapállapot energiája egy adott  $\{\mathbf{R}_L\}$  ion-elrendeződés esetén.

Feladatunk ezek után az elektronok alapállapot energiájának a meghatározása. Ebből a célból az (I.1) kifejezést célszerű kissé átrendezni, hiszen végtelen nagy rendszer esetén minden potenciális energia tag divergens a Coulomb erők végtelen hatótávolsága következtében. Az átrendezésnél a „semlegessé alakítás” elvét fogjuk követni, így (I.1) minden tagját véges mennyiséggé alakítjuk, melyek emellett fizikai jelentéssel is rendelkeznek. A végtelen nagy ion-ion taszítást leíró tag helyett a véges

ún. Madelung energiát kapjuk, ha az ionokat egy homogén, negatív háttérre helyezzük és tekintjük az így kapott semleges rendszer energiáját:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \tilde{E}_{ii} = E_M = & \frac{1}{2N} \sum_{L \neq L'} \frac{z^2 e^2}{|\mathbf{R}_L - \mathbf{R}_{L'}|} - \frac{1}{N} \sum_L \int \frac{ze}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_L|} (en_0) d\mathbf{r} + \\ & + \frac{1}{2N} \iint \frac{(en_0)(en_0)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (\text{I.4})$$

Itt  $n_0 = z/\Omega_0$  a homogén elektron-háttér sűrűsége, ahol az elektronok száma iononként,  $z$ ,  $\Omega_0$  pedig az egy ionra jutó térfogat. (I.1) és (I.4) utolsó tagjainak különbsége egy homogénen elkent *pozitív* háttérre helyezett elektron-rendszer kölcsönhatási energiáját fogja szolgáltatni:

$$\frac{1}{2} \tilde{E}_{ee} = \frac{1}{2N} \sum_{l \neq l'} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_{l'}|} - \frac{1}{2N} \iint \frac{(en_0)(en_0)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (\text{I.5})$$

A megmaradó potenciális energia tagokat összevonva kapjuk a most már *véges* ion-elektron kölcsönhatási energiát:

$$\tilde{E}_{ie} = \frac{1}{N} \sum_{L,l} V(\mathbf{R}_L - \mathbf{r}_l) + \frac{1}{N} \sum_L \int \frac{ze}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_L|} (en_0) d\mathbf{r}. \quad (\text{I.6})$$

Így az

$$\tilde{E} = \tilde{E}_k + \tilde{E}_{ie} + \frac{1}{2} \tilde{E}_{ee} + \frac{1}{2} \tilde{E}_{ii} \quad (\text{I.7})$$

kifejezésben most már minden tag véges. (Itt  $\tilde{E}_k$ -val jelöltük az elektronok kinetikus energiájának operátorát.) Az elektronrendszer alapállapotú energiáját tehát — az egzakt hullámfüggvény ismeretében — az

$$E_{el} = \left( \psi \left| \tilde{E}_k + \tilde{E}_{ie} + \frac{1}{2} \tilde{E}_{ee} \right| \psi \right) \quad (\text{I.8})$$

kifejezés adná. A pontos elektron — hullámfüggvényt azonban nem tudjuk meghatározni, ezért további közelítésekre vagyunk utalva (pl. perturbáció-számítás).

### 1. Egyszerű fémek

Határozzuk most meg az energia fenti kifejezése alapján az egyszerű fémek teljes energiáját. Régóta ismert, és az OPW, valamint a pszeudopotenciál módszer megalkotása óta egyszerűen megérthető tény, hogy az egyszerű fémekben — a magok közelében rendkívül erős elektron-ion potenciál ellenére — a vezetési elektronok közelítőleg szabadon mozgó részecskéknek tekinthetők. Ennek az a magyarázata — itt egyik módszer részletes ismertetésére sem térhetünk ki — hogy a betöltött törzselektron állapotok következtében a fémben mozgó elektron a magok közelében magasabb kinetikus energiájú állapotba kényszerül, a vezetési elektron hullámfüggvény a magok közelében „oszcillál”. Az ennek megfelelő „taszító” jellegű energijárulékot formálisan összevonhatjuk az eredeti elektron-ion potenciállal, melynek eredménye-



ként már egy gyenge „pszeudopotenciált” kapunk. A pszeudopotenciál terében mozgó elektronok „pseudo-hullámfüggvényei” már sima lefutásúak. Így — ha potenciálként a pszeudopotenciált használjuk — az egyszerű fémekben a vezetési elektronállapotok jó közelítéssel síkhullámoknak tekinthetők.

Szabad elektron hullámfüggvényeket használva könnyen meghatározhatjuk (I.8)-ban a kinetikus energia valamint (Hartree-Fock (HF) közelítésben) az elektron-elektron kölcsönhatási tag értékét:

$$E_k = \frac{2,21 z^{5/3}}{R_a^2} \quad (I.9)$$

$$\frac{1}{2} E_{ee} = -\frac{0,916 z^{4/3}}{R_a}.$$

Itt  $R_a$  az atomi, vagy Wigner—Seitz sugár;  $\frac{4\pi}{3} R_a^3 = \Omega_0$ . Most és a dolgozat további részében is az energiát  $ry$ -ben, a távolságot atomi (Bohr sugár) egységekben mérjük. (I.9)-ben a kinetikus energia értéke egyszerű számítás eredménye. (I.5)-ből pedig látható, hogy — HF közelítésben — az elektron-elektron kölcsönhatási tagban csak a kicserélődési energia marad. Megjegyezzük azonban, hogy a kohéziós energiaszámításokban nem hanyagolható el az elektronok közötti korrelációs energia sem, melynek figyelembevételére különböző közelítések ismeretesek. Mi Nozieres és Pines [53] közelítését fogjuk használni.

$$E_{\text{corr}} = -z[0,115 - 0,031 \ln(R_a/z^{1/3})]. \quad (I.10)$$

Így az elektron-elektron kölcsönhatás

$$\frac{1}{2} E_{ee} = -\frac{0,916 z^{4/3}}{R_a} + E_{\text{corr}} \quad (I.11)$$

alakú lesz. Vizsgáljuk meg ezután az elektron-ion kölcsönhatási energiát. A pszeudopotenciál perturbációs sorának segítségével  $E_{ie}$ -t a következő alakban állíthatjuk elő:

$$E_{ie} = E_1 + E_2 + E_3 + \dots \quad (I.12)$$

A fenti kifejezésben  $E_1$  az (I.6)-ban meghatározott elektron-ion kölcsönhatási tag átlagértéke. Mivel a potenciál a magtól távol (a Wigner—Seitz gömbön kívül) jó közelítésben Coulomb-szerű azaz  $-\frac{ze^2}{r}$  alakú, (I.6)-ban fellépő két tag járuléka az atomi gömbön kívül kioltják egymást, így az átlagérték kiszámítását elegendő az atomi gömbön belül elvégezni:

$$E_1 = (\psi | \sum_i V(\mathbf{r}_i) | \psi)_{(\Omega_0)} + \frac{3}{2} \frac{z^2 e^2}{R_a} = \frac{z}{\Omega_0} \int_{(\Omega_0)} v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{3}{2} \frac{z^2 e^2}{R_a}. \quad (I.13)$$

Ez az energiatag tehát arra jellemző, hogy az atomi gömbön belül a potenciál mennyire tér el a Coulomb alaktól. (Így a hidrogén-fém esetében ez a tag nulla.)



$E_2$ -re a perturbációs számítás másodrendjében a következő eredményt kapjuk:

$$E_2 = -\frac{\Omega_0}{2} \sum_{\mathbf{G} \neq 0} |V(\mathbf{G})|^2 \frac{\mathbf{G}^2}{8\pi} \left(1 - \frac{1}{\varepsilon}\right) |S(\mathbf{G})|^2. \quad (\text{I.14})$$

A fenti kifejezés meghatározásánál már fel van tételezve, hogy az ionok periodikus térrácsban helyezkednek el, ahol  $\mathbf{G}$  reciprokrács-vektor,  $\varepsilon$  a rendszer dielektromos állandója,  $V(\mathbf{G})$  pedig a potenciál Fourier-transzformáltja.  $S(\mathbf{G})$  az elemi cella struktúrafaktora, ami egyatomos elemi cellájú, egyszerű rácsok esetén eggyel egyenlő.  $E_2$  tehát már függ a kristály szerkezetétől, szemben az eddig tárgyalt energiataragokkal, melyek *csak* az atomi térfogattól függenek.

Hasonlóan szerkezettől függő energiajárulék a Madelung energia is, melyet (I.4) alapján az Ewald transzformáció segítségével határozhatunk meg, nagyságát viszont egyszerűen megbecsülhetjük. Ha a negatív háttérben elhelyezkedő pozitív töltésű ionok köré  $R_a$  sugarú gömböket képzelünk, az így kialakult semleges alakzatok közötti kölcsönhatást elhanyagolhatjuk (szabályos, különösen a szoros illeszkedésű szerkezetek esetében ez valóban jó közelítés, a gömbök csak kismértékben fednek át). Így a Madelung energia egy  $R_a$  sugarú gömbön belül  $n_0 = z/\Omega_0$  sűrűségű homogén elektrongáz és a  $ze$  töltésű mag elektrosztatikus energiája lesz:

$$E_M = -\frac{z^2 e^2}{2} \frac{\alpha}{R_a} \approx -\frac{z^2 e^2}{2} \frac{1,8}{R_a} \quad (\text{I.15})$$

$\alpha$  pontos értéke (4 jegy pontossággal) bcc, fcc és hcp szerkezetekre 1,792, valóban közel van a fenti értékhez.

A fentiek alapján tehát a pszeudopotenciál ismeretében meghatározhatjuk az egyszerű fémek teljes energiáját. A potenciál pontos alakját természetesen nem ismerjük, meghatározásánál ismét különböző közelítésekre vagyunk utalva. Gyakran használják az ún. modell-potenciálokat, melyeknél egy feltételezett függvényalak szabad paramétereit úgy határozzák meg, hogy az adott elem meghatározott fizikai tulajdonságait reprodukálják. A paraméterek értékeit gyakran a szabad ion energiaszintjeiből határozzák meg [54], [55], [40]. Az *Abarenkov* és *Heine* által javasolt modellpotenciálnak [55] egy egyszerűsített, lokális változata egy  $R_M$  sugarú gömbön belül az  $A_0 = \text{const.}$  értéket veszi fel, ezen a gömbön kívül pedig Coulomb-jellegű. Ennek a potenciálnak a felhasználásával a nátrium és a kálium kohéziós állandóira kapott értékeket az *I. táblázatban* hasonlítjuk össze a megfelelő kísérleti adatokkal (*Heine* [21] számításai nyomán, a számításban a másodrendű tag el van hanyagolva).

I. TÁBLÁZAT

	$R_a$		$-E$		$K = 1/B$	
	kísérlet (a. u.)	elmélet	kísérlet (ry)	elmélet	kísérlet ( $10^{-13} \text{cm}^2 \text{dyn}^{-1}$ )	elmélet
Na	3,93	4,24	0,460	0,457	156	180
K	4,96	5,36	0,388	0,369	350	456



Az Abarenkov—Heine modellpotenciál  $A_0=0$  speciális esetében az Ashcroft-potenciálhoz [56], [57] jutunk. Ebben az esetben tehát energiakifejezésünk csak egyetlen paramétert tartalmaz, melyet a továbbiakban  $R_c$ -vel jelölünk, és amely szoros kapcsolatban áll az iontörzs sugarával. Ezt igazolja — egyszerű fémek esetében — az egyensúlyi adatokból meghatározott paraméter jó egyezése az iontörzs sugarára vonatkozó atomfizikai számítások eredményével [20], [24]. Megjegyezzük továbbá, hogy egyvegyértékű fémek esetén  $E_1$ -ben fellépő az Ashcroft potenciál átlagát tartalmazó tag megegyezik a Fröhlich [15] által megadott, a legalacsonyabban fekvő vezetési elektronállapot energiáját közelítő kifejezéssel:

$$e_s^b = -\frac{3}{R_a} + \frac{3R_c^2}{R_a^3}. \quad (\text{I.16})$$

A fentiek alapján tehát megállapíthatjuk, hogy az alkálifémek kohéziós jellemzőire egyszerű modellpotenciálok felhasználásával már elsőrendben is kielégítő eredményeket kapunk. Vizsgáljuk most meg a másodrendű tag hatását, melyet a *II. táblázat* szemléltet kálium esetében [24]:

II. TÁBLÁZAT

	$E$ (ry)	$B$ (kbar)
számított érték	−0,389	36,8
másodrendű tag	−0,007	−5,3

A fentiek alapján tehát indokoltnak látszik a szerkezetfüggő tagok elhanyagolása a kohéziós paraméterek meghatározásánál egyvegyértékű fémek esetében. Nagyobb vegyértékek esetén azonban — mint a későbbiekben látni fogjuk — a másodrendű tag szerepe nem elhanyagolható, hatása különösen az energia rácsállandó szerinti második deriváltját tartalmazó mennyiségekben (térfogati modulus, rugalmas állandók) jelentős. Az energia sorfejtésében fellépő magasabbrendű tagokkal a dolgozatban nem kívánunk foglalkozni, bár ezek szerepe nagyobb vegyértékek és meghatározott kristályszerkezetek esetén nem elhanyagolható a kohéziós és rugalmas tulajdonságok meghatározásánál [27].

Ezután — bár a dolgozatban az egyszerű fémekkel nem foglalkozunk részletelesen — bevezetünk néhány közelítést, melyeket a továbbiakban fel fogunk használni. A potenciál átlagának meghatározásánál bevezetjük — az effektív töltésként értelmezhető —  $\lambda$  paramétert, mellyel a szabad elektronsűrűségnek a betöltött törzselektron állapotok következtében bekövetkező csökkenését vesszük figyelembe az iontörzs tartományában, valamint a megfelelő töltéssűrűség-növekedést a Wigner—Seitz gömb külső részein [17], [18], [19]. Ezenkívül figyelembe kívánjuk venni a szabad elektronsávnak a pszeudopotenciál energiafüggése következtében fellépő kiszélesedését is, amit — első közelítésben — a szabad elektronérték  $\lambda$ -val való szorzásával tehetünk meg [23]. Az OPW formalizmusban  $\lambda$  értékét a következő egyenlet határozza meg [17]:

$$\lambda = \left\{ \left( 1 - \sum_c |\langle \mathbf{k} | \varphi_c \rangle|^2 \right)^{-1} \right\}_{av} \quad (\text{I.17})$$

(törzs)

Itt az összegezést az összes  $\varphi_c$  törzselektron-állapotra kell elvégezni. A  $(\mathbf{k}|$  jelölés síkhullámállapotot jelent, az „av” index pedig arra utal, hogy a zárójeles kifejezést  $\mathbf{k}$  összes értékére átlagolni kell. Az egyszerűség kedvéért azonban a hullámszámtérben elvégzendő átlagolás helyett  $\lambda$  értékét a  $\mathbf{k}=0$  állapotra számítottuk ki. Ez jó közelítésnek látszik, mivel  $\mathbf{k}$  növekedése esetén  $(\mathbf{k}|\varphi_s)$  csökkenését  $(\mathbf{k}|\varphi_p)$  növekedése kompenzálja ( $\varphi_s$  és  $\varphi_p$  az  $s$ , ill.  $p$  elektronok hullámfüggvényei). A fentiek alapján tehát

$$\lambda \approx \lambda_0 = \left(1 - \sum_{\substack{s \\ (\text{törzs})}} |(0|\varphi_s)|^2\right)^{-1} \quad (\text{I.18})$$

melyet a következő egyszerű formába írhatunk át:

$$\lambda_0 = \frac{1}{1 - \left(\frac{R_c}{R_a}\right)^3} \quad (\text{I.19})$$

ahol

$$R_c^3 = \frac{3}{4\pi} \sum_{\substack{s \\ (\text{törzs})}} \left| \int \varphi_s d\mathbf{r} \right|^2. \quad (\text{I.20})$$

Az elektron-ion kölcsönhatási energia meghatározásánál az Ashcroft potenciált fogjuk használni. Így a teljes energia másodrendben:

$$E = E_M + E_k + E_1 + E_2 + \frac{1}{2} E_{ee} \quad (\text{I.21})$$

alakú, az általunk módosított energiatagok pedig

$$E_K = \frac{2,21 z^{5/3}}{R_a^2} \lambda_0 \quad (\text{I.22})$$

$$E_1 = z^2 \lambda_0 \left( -\frac{3}{R_a} + \frac{3R_c^{(1)2}}{R_a^3} \right) + \frac{3z^2}{R_a} \quad (\text{I.23})$$

$E_2$ -t (I.14) alapján határozzuk meg, az Ashcroft potenciál Fourier-transzformáltja segítségével:

$$V(|\mathbf{G}|) = -\frac{8\pi z}{\Omega_0 |\mathbf{G}|^2} \cos |\mathbf{G}| R_c^{(2)} \quad (\text{I.24})$$

$E_1$  és  $E_2$  kifejezésében láthatóan két különböző Ashcroft sugarat használtunk. Ennek oka a következő: ilyen egyszerű alakú pseudopotenciál esetén hiba lenne feltételezni, hogy egy adott paraméterérték mellett a reciproktér teljes tartományában jól közelíti a valódi elektron-ion potenciált (a reciproktérben  $E_2$ -t elsősorban az első reciprokrács-vektornál felvett érték,  $E_1$ -et pedig a nulla körüli viselkedés határozza meg). Továbbra is meg kívánjuk őrizni azonban az Ashcroft potenciál paramétereinek szemléletes fizikai jelentését, ezért feltételeztük, hogy  $R_c^{(1)}$  és  $R_c^{(2)}$  arányos az iontörzs sugarával [3], [4]

$$\begin{aligned} R_c^{(1)} &= \mu R_p \\ R_c^{(2)} &= \nu R_c^{(1)}. \end{aligned} \quad (\text{I.25})$$

Itt az iontörzsok kiterjedésének mértékéül az  $R_p$  Pauling sugarat választottuk.



Ezután nézzük meg, milyen eredményeket kapunk a fenti modell felhasználásával a fémek kohéziós jellemzőire. A számítást számos fém esetében (egyszerű, ritka földfémek, valamint az átmeneti fémsorozatok első elemei) először úgy végeztük el az (I.21) kifejezés alapján, hogy az „ortogonalitási lyuk”-korrekciót nem vettük tekintetbe ( $\lambda=1$ ) [4], [5], [6]. Számításaink azt mutatták, hogy a  $\mu=1$  és  $\nu=0,86$  paraméterérték-választás mellett az egyensúlyi atomi sugár a legtöbb fém esetében jó eredményeket kapunk, és emellett a teljes energia és a térfogati modulus értéke is kielégítően egyezik a kísérletekkel. Ezek az eredmények tehát azt mutatják, hogy paramétereinknek (I.25) alatt feltételezett arányossága az iontörzs sugarával valóban fennáll, a  $\mu$  és  $\nu$  arányossági tényezők pedig *univerzális* állandók.

Ezután elvégeztük a számítást néhány egyszerű (ill. jó közelítéssel egyszerűnek tekinthető) fém esetében úgy, hogy  $\lambda$  értékét (I.19) alapján határoztuk meg [3] (megjegyezzük, hogy  $\lambda$  kifejezésében szerepel az  $R_c^{(1)}$  paraméter). A  $\mu$  és  $\nu$  arányossági tényezők értékeit minden esetben úgy határoztuk meg, hogy az egyensúlyi atomi sugár és a térfogati modulus értékeire a kísérleteknek megfelelő eredményeket kapjunk. A számítás eredményeit a *III. táblázatban* gyűjtöttük össze. A számítást a megfigyelt kristályszerkezetek felhasználásával végeztük el.

III. TÁBLÁZAT

Elem	Vegyérték	$\mu=R_c^{(1)}/R_P$	$\nu=R_c^{(2)}/R_c^{(1)}$
Na	1	1,21	0,68
K	1	1,18	0,62
Rb	1	1,16	0,60
Al	3	1,15	0,68
Sc	3	1,28	0,68
Y	3	1,23	0,65

A táblázatból látható, hogy ebben az esetben a  $\mu=1,20$  és  $\nu=0,66$  átlagértékeket kapjuk, melyek felhasználásával az egyensúlyi atomi sugár és a térfogati modulus értékein kívül a teljes energia is jól egyezik a kísérleti értékekkel. A köbös szerkezetű fémek esetében kiszámítottuk a nyírási rugalmas állandók értékét is, melyek nagyságrendben egyeztek a mért értékekkel.

## 2. Átmeneti és nemesfémek

A vizsgált — d elektronokat is tartalmazó — fémek teljes energiáját (I.1) alapján határozzuk meg. Feltételezzük továbbá, hogy az átmeneti és nemesfémek kötésben résztvevő elektronjai kétféle kvantumállapotban lehetnek: szorosan kötött, atomi jellegű d pályákon és az egész kristályra kiterjedő Sommerfeld—Bloch típusú s pályákon. A fenti leírásban tehát láthatóan nem vesszük figyelembe az s és d pályák hibridizációját. Ezzel kapcsolatban megjegyezzük, hogy az s—d hibridizációnak az átmeneti és nemesfémek teljes energiájának meghatározásában játszott szerepe még tisztázatlan kérdés, jelentőségéről a vélemények megoszlanak [35], [37]. Mi azt az álláspontot képviseljük, hogy a teljes energiát *elsősorban* az *átlagos* elektronsűrűség, az elektron-ion potenciál átlagos értéke és az iontörzsek kiterje-



dése határozza meg; az egyelektron spektrumot esetleg erősen befolyásoló egyéb tényezők — mint például az s—d hibridizáció — csak másodlagos jelentőségűek [71].

A fenti kétfajta elektronállapot feltételezésével az elektronrendszer sűrűségmátrixa [51] az s és d elektronsűrűségek összegeként állítható elő

$$\varrho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \varrho^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \varrho^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (\text{I.26})$$

ahol az s és d indexek s, ill. d elektronokat jelölnek. A sűrűségmátrix fenti felbontását és az (I.1) Hamilton operátort felhasználva az elektronrendszer teljes energiája is két tagra bontható:

$$E_{el} = E^s + E^d \quad (\text{I.27})$$

ahol az (I.8) felbontásnak megfelelően

$$E^s = \left( E_k^s + E_{ie}^s + \frac{1}{2} E_{ee}^s \right) + E_{ee}^{sd} \quad (\text{I.28})$$

$$E^d = E_k^d + E_{ie}^d + \frac{1}{2} E_{ee}^d. \quad (\text{I.29})$$

Megjegyezzük, hogy (I.4), (I.5) és (I.6) kifejezésekben fellépő „semlegesítő” tagok hozzáadását csak az s elektronrészre végezzük el, hiszen feltételezésünk értelmében a d elektronok jól lokalizáltak az ionok körül és így — ebből a szempontból — az iontörzshöz tartozóknak tekinthetjük őket. (I.28) jobb oldalán álló zárójeles kifejezés egy hipotetikus egyszerű fém elektronenergiája, ahol  $z_s$  s elektron mozog a  $z_s + z_d$  töltésű ionok terében ( $z_d$  a d elektronok száma). Az energiának erre a részére tehát alkalmazhatók az egyszerű fémek esetében használt közelítéseink. A d elektronok hatását leíró  $E_{ee}^{sd}$  kölcsönhatási tagot pedig összevonhatjuk  $E_{ie}^s$ -vel és így egy „effektív potenciál”-ként értelmezhetjük:

$$E_1^s = z_s(\psi_s | V | \psi_s) + E_{ee}^{sd} + \frac{3}{2} \frac{z_s^2 e^2}{R_a} = z_s(\psi_s | V_{\text{eff}} | \psi_s) + \frac{3}{2} \frac{z_s^2 e^2}{R_a}. \quad (\text{I.30})$$

Ha pszeudopotenciálként egy egyszerű Ashcroft potenciált használunk az s elektronokra ható potenciál átlagértékének meghatározására, (I.23) alapján nyerjük:

$$\begin{aligned} E_1^s &= z_s(z_s + z_d) \lambda_0 \left( -\frac{3}{R_a} + \frac{3(R_c^{(1)})^2}{R_a^3} \right) + E_{ee}^{sd} + \frac{3z_s^2}{R_a} = \\ &= z_s z_{\text{eff}}^s(R_a) \lambda_0 \left( -\frac{3}{R_a} + \frac{3(R_c^{(1)})^2}{R_a^3} \right) + \frac{3z_s^2}{R_a}. \end{aligned} \quad (\text{I.31})$$

A fenti leírásban tehát az s elektronok — a d elektronok tökéletes árnyékolása következtében — egy  $z_{\text{eff}}^s > z_s$  effektív iontöltést éreznek. (I.31)-ből látható, hogy  $z_{\text{eff}}^s$  általában függ  $R_a$ -tól, értéke azonban — mint később látni fogjuk — az egyensúlyi atomi sugarak környezetében jó közelítéssel állandónak tekinthető. A sáv aljának az egyszerű, egyvegyértékű fémek esetében megismert, (I.16) alatti (Fröhlich-féle)



kifejezéséhez hasonlóan  $z_s = 1$  esetén most is definiálhatjuk a legalacsonyabban fekvő vezetési (s) elektronállapot energiáját a következő módon:

$$\varepsilon_b^s = z_{\text{eff}}^s \lambda_0 \left( -\frac{3}{R_a} + \frac{3(R_c^{(1)})^2}{R_a^3} \right). \quad (\text{I.32})$$

A  $\varrho^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  sűrűségmátrix segítségével a d energia (I.29) kifejezésében szereplő tagokat a következő módon írhatjuk fel:

$$\begin{aligned} E_k^d &= \frac{1}{N} \int -\nabla_{\mathbf{r}}^2 \varrho^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}')_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} d\mathbf{r} \\ E_{ie}^d &= \frac{2}{N} \left\{ \int \frac{\varrho^d(\mathbf{r}) \varrho^c(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' - \frac{1}{2} \int \frac{\varrho^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varrho^c(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \right\} \\ E_{ee}^d &= \frac{2}{N} \left\{ \int \frac{\varrho^d(\mathbf{r}) \varrho^d(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' - \frac{1}{2} \int \frac{\varrho^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varrho^d(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \right\}. \end{aligned} \quad (\text{I.33})$$

Itt  $\varrho^c(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  a törzselektron állapotok sűrűségmátrixa, a sűrűségmátrixok  $\varrho^d(\mathbf{r})$  és  $\varrho^c(\mathbf{r})$  diagonális komponenseit pedig a következő egyenletek definiálják:

$$\begin{aligned} \varrho^d(\mathbf{r}) &= \varrho^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \\ \varrho^c(\mathbf{r}) &= \varrho^c(\mathbf{r}, \mathbf{r}) - A \sum_L \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_L). \end{aligned} \quad (\text{I.34})$$

A fenti kifejezésben  $A$  az elem rendszáma.

A d energia (I.29) alatti kifejezését átírhatjuk a következő alakba

$$E^d = \frac{1}{N} \sum \varepsilon^d - \frac{1}{2} E_{ee}^d - E_{ee}^{sd}. \quad (\text{I.35})$$

Itt a jobb oldal első tagja a d egy-elektron energiák összege, amelyből le kell vonnunk a d elektronok közötti elektron-elektron kölcsönhatást (mivel ezt az összegezésnél kétszer vettük figyelembe), valamint az s—d kölcsönhatási tagot, ami (I.29)-ben nem szerepel. A d egy-elektron energiák összegét pedig a következő alakba írhatjuk:

$$\frac{1}{N} \sum \varepsilon^d = z_d \varepsilon_g^d + E_{BS}^d. \quad (\text{I.36})$$

Itt  $\varepsilon_g^d$ -vel a d sáv középpontját,  $E_{BS}^d$ -el pedig a sávenergiát jelöltük.

A fentieket összefoglalva tehát az átmeneti és nemesfémek teljes energiáját a következő alakban írhatjuk fel:

$$E = E_{el} + \frac{1}{2} E_{ii} = E^s + E^d + \frac{1}{2} E_{ii} \quad (\text{I.37})$$

ahol (I.11), (I.15) és (I.22) felhasználásával

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} E_{ii} &= E_M = -\frac{\alpha z_s^2}{R_a} \\ E^s &= \frac{2,21 z_s^{5/3}}{R_a^2} \lambda_0 - \frac{0,916 z_s^{4/3}}{R_a} + E_{\text{corr}} + E_1^s + E_2^s \end{aligned} \quad (\text{I.38})$$

$E_1^s$  és  $E_2^s$ -t (I.31), ill. (I.14) alapján számíthatjuk ki. A d energiát a sűrűségmátrixok segítségével (I.33) alapján, vagy — a sáv szerkezet ismeretében — (I.35) és (I.36) felhasználásával határozhatjuk meg.

Ezután — a fenti energia-kifejezések alapján — a dolgozat következő részeiben áttérünk az átmeneti és nemesfémek kohéziós és rugalmas jellemzőinek konkrét vizsgálatára.

## II. RÉSZ

### Átmeneti fémek

#### 1. Kohéziós paraméterek rendszámfüggése

Ebben a fejezetben az atomi térfogat, a kohéziós energia és a térfogati modulus rendszámfüggésének általános tendenciáit vizsgáljuk az átmeneti fémsorozatokban.

A számításokat egy idealizált 3d sorozatra végeztük el. Egy olyan modell létrehozására törekedtünk, amely amellet, hogy tartalmazza az adott fizikai helyzet lényeges vonásait, egyszerűen kezelhető. Ennek érdekében a következő fontosabb közelítéseket alkalmaztuk:

- i) minden elemre hasonló, lapcentrált köbös szerkezetet tételeztünk fel,
- ii) elhanyagoltuk a d-sáv felhasadását a hullámszám-térben,
- iii) nem vettük figyelembe a mágnességgel kapcsolatos hatásokat.

Modellünk a szorosan kötött d-sáv és a közel-szabad s elektronok energiáját veszi figyelembe. Ez a modell a TB-NFE közelítés egy egyszerűsített formájának tekinthető, ahol a hibridizációs tagokat elhanyagoljuk. A dolgozatnak ebben a részében feltételezzük továbbá, hogy az átmeneti fémsorozat — egyes elemekre kissé fluktuáló — elektronkonfigurációja a legáltalánosabb 'egész' konfigurációval,  $3d^n 4s$ -sel jellemezhető.

Ezután a fenti közelítések felhasználásával rátérünk a teljes energia konkrét meghatározására az (I.37) kifejezés alapján.

#### 1/a A d-sáv energiája.

Induljunk ki a d energia (I.35) alatti kifejezéséből. Watson et al. [39] a 'renormált atom'-modell felhasználásával megmutatták, hogy az általuk vizsgált kobalt, nikkell és réz esetében az (I.35)-ben fellépő  $z_d e_g^d - \frac{1}{2} E_{ee}^d - E_{ee}^{sd}$  mennyiség értéke a megfigyelt atomi sugár tartományában közelítően megegyezik a megfelelő atomi értékkel. Ez annak a következménye, hogy az 'átlagos' d-nívó erős növekedését (Watson et al. [39] számításai szerint réz esetén  $\sim 0,5$  ry) a teljes energiában ellentétes előjellel fellépő d—d kölcsönhatási energia növekedése közelítőleg semlegesíti. A kohéziós energia számításánál tehát a d elektronok járulékát a d-sávénergiaival közelíthetjük. Az elhanyagolt tagok szerepének vizsgálatára a dolgozat III. részében visszatérünk.

Ezután ismertetjük a d-sávénergia meghatározásánál alkalmazott modellünket.

Figyelembe véve a 'model Hamiltonian' közelítés eredményeit [58], feltételezzük, hogy a TB-közelítés alkalmas a d sávénergia kiszámítására. Ennek felhasználásával



könnyen meghatározhatjuk az állapotsűrűséget a sorozat egyes elemeire [59], [60]. A fenti feltevések alapján, fcc szerkezetre az

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon_g^d + 4I \left\{ \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} + \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} \right\} \quad (\text{II.1})$$

diszperzió adódik, modellünkben tehát a d-sáv 10-szeresen degenerált. (Hasonló modell-diszperziót gyakran használtak szorosan kötött elektronok vizsgálatánál [61], [62].) A (II.1) kifejezésben  $a$  a rácsállandót jelenti, az  $I$  effektív átfedési integrál pedig a következő egyenlet definiálja:

$$I = \gamma I_0(z_d, R_{nn}) = \gamma \int \Phi_d^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{nn}) V_d(\mathbf{r}) \Phi_d(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (\text{II.2})$$

ahol  $\gamma$  később meghatározandó paraméter,  $\mathbf{R}_{nn}$  a legközelebbi szomszéd atom helyzetvektora,  $\Phi_d$  a d hullámfüggvény,  $V_d$  pedig a rácpotenciál. A fémekben természetesen sem a d hullámfüggvények, sem a rácpotenciál pontos alakját nem ismerjük, ezért  $I_0$  meghatározásához különböző feltevések szükségesek. Ezek modellünkben a következők:

A  $V_d$  rácpotenciálra az Asdente és Friedel által javasolt egyszerű, analitikus formát tételeztük fel [60]:

$$V_d(r) = \begin{cases} -Z_{\text{eff}}^d \left[ \frac{1}{r} - \frac{2}{R_{nn}} \right] & r < R_{nn}/2 \\ 0 & r > R_{nn}/2 \end{cases} \quad (\text{II.3})$$

ahol a  $Z_{\text{eff}}^d$  effektív töltést a Slater-szabály segítségével határoztuk meg:

$$Z_{\text{eff}}^d = 0,65z_d + 0,35. \quad (\text{II.4})$$

A d hullámfüggvények leírására Slater-típusú hullámfüggvényeket használtunk:

$$\Phi_d(r) = S r^2 e^{-Z_{\text{eff}}^d r/3} \quad (\text{II.5})$$

ahol  $S$  a normálási állandó.

Az átfedési integrál meghatározása után (II.1) felhasználásával kiszámíthatjuk a d elektronok sávenergiáját:

$$E_{BS}^d = \int (\varepsilon - \varepsilon_g^d) N(\varepsilon) d\varepsilon = 120A(z_d) I(z_d, R_{nn}). \quad (\text{II.6})$$

Itt  $N(\varepsilon)$  az állapotsűrűség, az  $A(z_d)$  függvényre pedig a következő egyenlet adódik:

$$A(z_d) = \frac{1}{3N} \int_{(z_d)} \left[ \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} + \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} \right] \frac{V}{(2\pi)^3} d\mathbf{k}. \quad (\text{II.7})$$

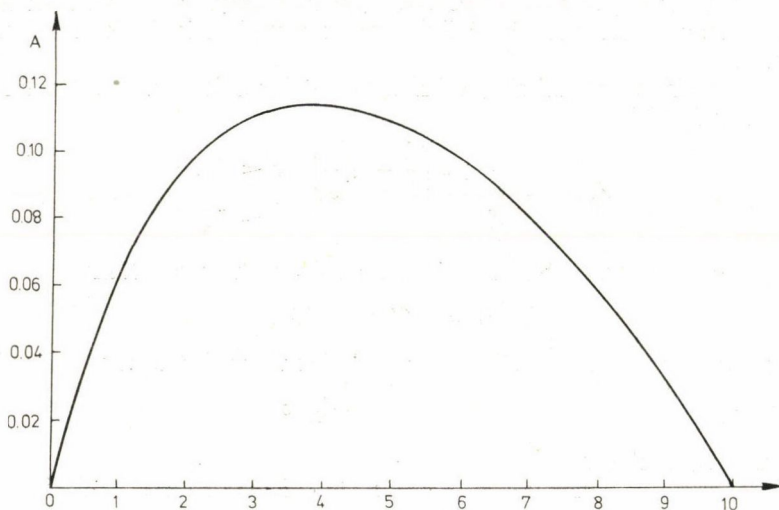
Az integrálást — adott  $z_d$  betöltési szám esetén — a Brillouin-zóna betöltött tartományára kell elvégezni. (A  $k$ -térben a Fermi-felületet az határozza meg, hogy  $z_d = 10$  esetén töltődik meg a teljes Brillouin-zóna.) Az  $A(z_d)$  függvényt az 1. ábra mutatja. Az ábrán látható, hogy a függvény a  $z_d = 0$  (üres sáv) és a  $z_d = 10$  (telt sáv) helyeken nullává válik. Betöltött sáv esetén ez annak a következménye, hogy a kötő és lazító Bloch-állapotoknak megfelelő pozitív, ill. negatív energijárulékok semlegesítik egymást.

A fenti sávszerkezetnek megfelelő állapotsűrűséget a következő módon határozhatjuk meg:

$$N(\varepsilon_F) = \left( \frac{d\varepsilon_F}{dz_d} \right)_{z_d=z_d(\varepsilon_F)} = \left( 120I \frac{d^2 A}{dz_d^2} \right)_{z_d=z_d(\varepsilon_F)}.$$

Az állapotsűrűséget a 2. ábrán láthatjuk. A rendkívül egyszerű alakú (II.1) modell-diszperzió ellenére a görbe reprodukálja a lapcentrált köbös szerkezetű átmeneti fémek tényleges állapotsűrűségének néhány jellegzetes vonását, nevezetesen a hossz-szan elnyúló „farkat” a sáv aljánál és az éles csúcsot a sáv tetején.

A  $d$  sávénergia meghatározásánál alkalmazott közelítéseink lényegében meg-egyeznek Ducastelle és Cyrot—Lackmann közelítéseivel [34], különbség csupán az átfedési paraméterek számában van (esetünkben egyetlen  $I$  átfedési paraméter lép fel a [34]-ben használt  $I_\sigma$ ,  $I_\pi$ , és  $I_\delta$  helyett).



1. ábra. A (II. 7) kifejezésben definiált  $A(z)$  függvény

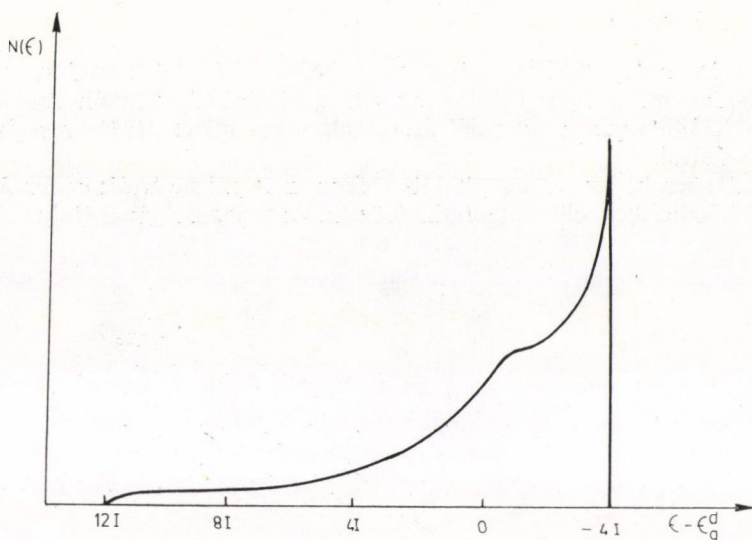
Ezután megvizsgáljuk az átfedési integrálra és a sáv szélességre kapott eredményeinket.

Az  $I_0$  átfedési integrál  $R_{nn}$  és  $z_d$  függését a 3., ill 4. ábrán láthatjuk. A 3. ábrán a  $z_d = 8,9$  betöltési számhoz tartozó görbék jól megfelelnek Heine  $1/R^5$  alakú távolság-függésének a  $4,5 < R_{nn} < 7$  tartományban, míg a többi esetben ez a függés többé-kevésbé eltérő alakú (az eltérés azonban csak az átfedési integrál deriváltjainál válik lényegessé).

Összehasonlítva a 4. ábrán látható  $I_0(z_d, R_{nn} = \text{const.})$  függvényt  $I_\sigma$  és  $I_\pi$  rendszámfüggésével (ld. az 1. ábra [34]-ben), azt tapasztaljuk, hogy a három mennyiség hasonló rendszámfüggést mutat. Ezért várható, hogy egyetlen  $I_0$  paraméter felhasználásával is sikerül helyesen leírunk a számolt mennyiségek rendszámfüggését.

Ezután rátérünk  $\gamma$  meghatározására. A paraméter értékét úgy határoztuk meg, hogy modellünkben a sáv szélességek értékei megegyezzenek Ducastelle és Cyrot




 2. ábra. A (II.1) modelldisziperzióknak megfelelő  $N(\varepsilon)$  állapotsűrűség

—Lackmann megfelelő eredményeivel [34]. A hullámszám-térben felhasadt TB d sáv esetén a  $W$  sáv szélesség értékét a

$$W = 16 \left[ -\frac{3}{8} I_\sigma + \frac{2}{8} I_\pi + \frac{1}{8} I_\delta \right] \quad (\text{II.8})$$

kifejezés határozza meg, míg modellünkben a

$$W = 16\gamma I_0 \quad (\text{II.9})$$

képlet segítségével számíthatjuk ki a sáv szélességet. A két kifejezés összehasonlításából — mivel  $I_\delta$  értéke elhanyagolhatóan kicsi [59] —  $\gamma$ -ra a következő egyenletet kapjuk.

$$\gamma I_0(z_d) = -\frac{3}{8} I_\sigma(z_d) + \frac{1}{4} I_\pi(z_d). \quad (\text{II.10})$$

A (II.10) egyenlőség a  $\gamma=0,39$  érték választása mellett kielégítő pontossággal teljesül a 3d sorozat minden elemére.

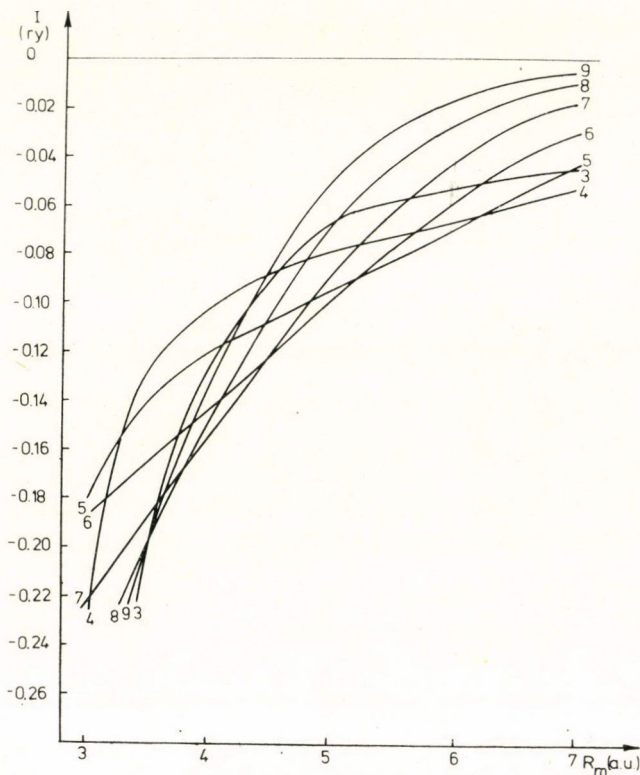
Az átfedési integrál, azaz  $I_0$  és  $\gamma$  ismeretében (II.9) alapján tehát meghatározhatjuk a 3d sorozat elemeinek sáv szélességét. Eredményeink — összhangban más számítások eredményeivel [63], [64] — azt mutatják, hogy a d sáv szélességének a rendszám függvényében maximuma van a króm közelében (lásd  $I_0$  rendszámfüggését a 4. ábrán).

A sáv szélességek, azaz modellünkben az  $I$  átfedési integrál segítségével tehát (II.6) alapján előállítottuk a d sáv energiáját, mint  $Z_d$  és  $R_{nn}$  függvényét. Ezután az s sáv energiájának meghatározásával foglalkozunk.

## 1/b Az s sáv energiája.

Az s elektronok járulékat a teljes energiához az (I.38) kifejezés felhasználásával fogjuk kiszámítani a másodrendű tag elhanyagolásával. Foglalkozunk először (I.31), ill. (I.32) alapján a potenciál átlagának, azaz (mivel  $z_s=1$ ) az s sáv aljának meghatározásával.

Az (I.31)-ben bevezetett  $z_{\text{eff}}^s$  általában függ az atomi sugártól; ezt az  $R_a$ -függést most első közelítésben elhanyagoljuk. Közelítésünk jogosságát a dolgozat III. ré-



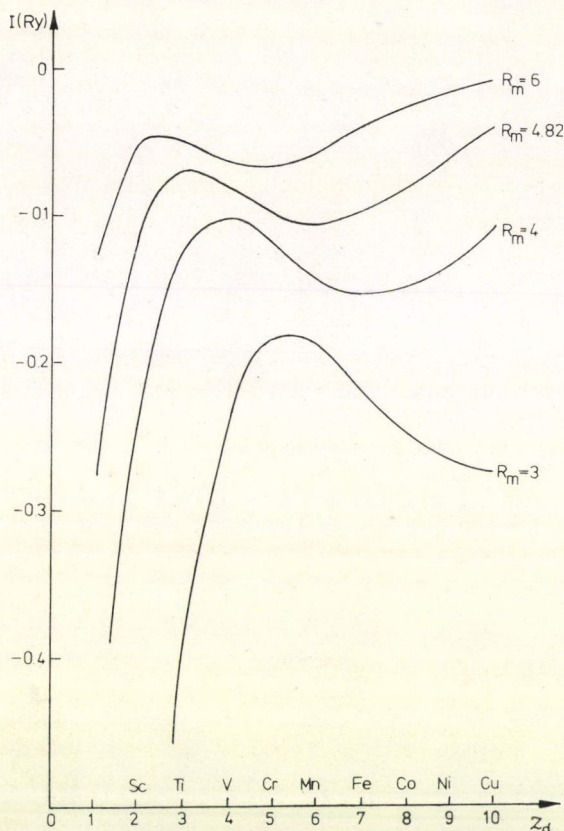
3. ábra. Az I átfedési integrál  $R_m$  függvényében a  $z_d$  d elektronszám különböző értékeinél ( $R_m$  a legközelebbi szomszédok távolsága)

szében igazolni fogjuk. Az alkáli fémek esetében, melyek atomonként egy vezetési elektront tartalmaznak,  $z_{\text{eff}}^s = z_s = 1$ . Az átmeneti fémeknél azonban — ahol a pontos ióntrözs-közelítés már nem tartható fenn — a d elektronok tökéletlen árnyékolása következtében az effektív töltés értéke egynél nagyobb lesz. Növekvő d elektronszámmal (és növekvő magtöltéssel)  $z_{\text{eff}}^s$  értéke nőni fog; ezt a növekedést a Slater-szabálynak megfelelően lineáris  $z_d$ -függéssel közelítettük:

$$z_{\text{eff}}^s = 1 + \alpha z_d \quad (\text{II.11})$$



ahol  $\alpha$  szabad paraméter. A Slater-szabály — atomok esetében használt — árnyékolási konstansainak felhasználásával az  $\alpha=0,15$  értéket kapjuk. A fémekben azonban ez az érték valamivel kisebb; Austin és Heine [65] becslései alapján  $z_{\text{eff}}^s$  növekedése a sorozat végén is csupán néhány százalékra tehető (a becslést a pszeudopotenciál-



4. ábra. Az  $I$  átfedési integrál a  $Z_d$  betöltési szám függvényében  $R_{nn}$  különböző értékei mellett

közelítés alkalmazásával az arany esetében végezték el atomi sugárfüggő iontöltést használva).

További közelítésként elhanyagoltuk az „ortogonalitási lyuk” következtében fellépő effektív töltésnövekedést, azaz a szabad elektronközelítésnek megfelelő  $\lambda=1$  értéket használtuk. Modellünk paraméterei tehát a (II.11)-ben fellépő  $\alpha$ , valamint az a sáv aljának (I.32) alatti kifejezésében szereplő  $q^2=3R_c^2$  mennyiségek.

A fentiek alapján (I.38), (I.31), (II.11), valamint a d sávenergia (II.6)-ban meghatározott kifejezésének felhasználásával a teljes energiának egy kétparaméteres, közelítő kifejezését állítottuk elő. Ennek felhasználásával ezután rátérünk a 3d sorozat atomi térfogat, kohéziós energia és kompresszibilitás értékeinek a meghatározására.

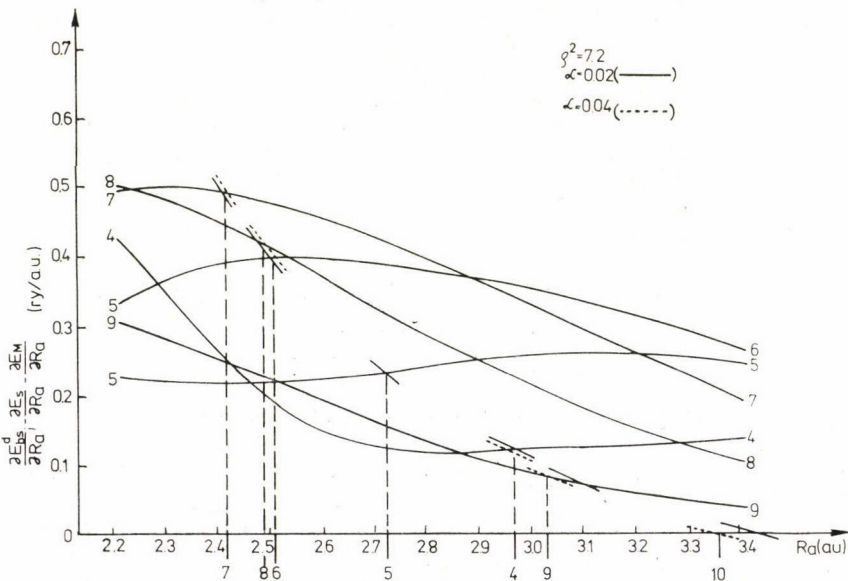
## 1/c Atomi térfogat.

A teljes energia (I.37) alatti felbontása esetén az atomi sugár értékét a következő egyenlet definiálja:

$$\frac{\partial E^d(z_d, R_a)}{\partial R_a} = -\frac{\partial E^s(z_d, R_a)}{\partial R_a} - \frac{\partial}{\partial R_a} \left( \frac{1}{2} E_{ii} \right). \quad (\text{II.12})$$

Az egyenlet két oldalának a fenti modell alapján számolt értékeit az 5. ábra mutatja. A számokkal jelzett görbék (II.12) bal oldalát jelentik a  $z_d$  betöltési szám különböző értékeinél. Az egyenlet jobb oldalát ábrázoló, a  $q^2 = 3R_c^2$  paraméter különböző értékeihez tartozó görbék közel párhuzamosak egymással a  $7 < q^2 < 12$  tartományban ( $q^2$  kisebb értékéhez kisebb  $s$  elektronnyomás tartozik). A  $q^2 = 7,2$  érték választása mellett az atomi sugarak (II.12) alapján számolt értékei a kísérleti értékek tartományába esnek, és ugyanakkor reális eredményeket kapunk az  $s$  sáv aljára, valamint a teljes energiára is (ld. később). Mivel  $E^s$  szintén függ a  $z_d$  betöltési számtól, a különböző  $-\frac{\partial}{\partial R_a} \left( E^s + \frac{1}{2} E_{ii} \right)$  görbéket csak a metszéspontok környezetében ábrázoltuk.

A metszéspontok alapján kapott egyensúlyi atomi sugarakat a 6. ábra mutatja a megfelelő kísérleti értékekkel együtt, amelyeket mind a három átmeneti fém sorozat esetében ábrázoltunk. Az ábráról látható, hogy az elméleti görbe reprodukálja a kísérleti értékek jellegzetes változását, nevezetesen a  $z_d = 7$  betöltési szám

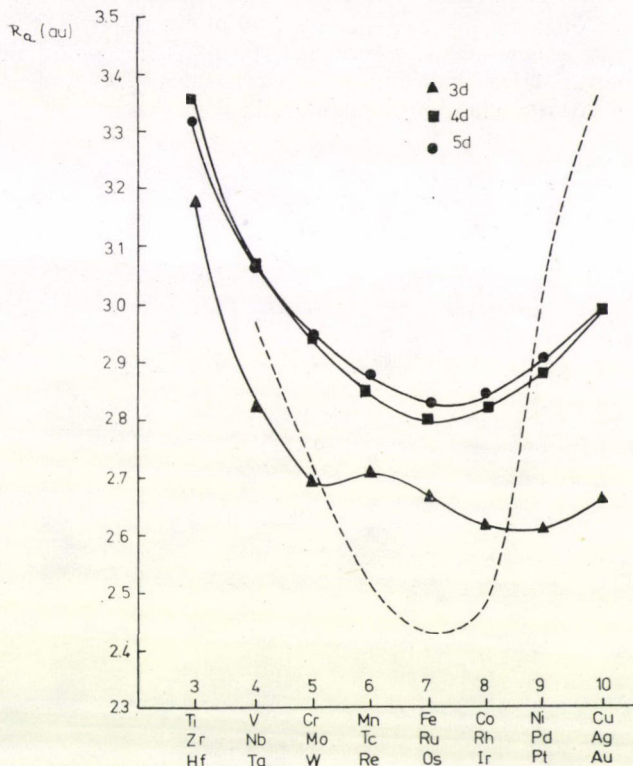


5. ábra. A  $\frac{\partial E_{BS}^d}{\partial R_a}$  és  $-\frac{\partial}{\partial R_a} (E^s + E_M)$  mennyiségek az  $R_a$  atomi sugár függvényében. A folytonos vonalak a  $d$  sávénergia deriváltjait jelentik a  $z_d$  betöltési szám különböző értékeinél. Az  $s$  energia deriváltját a  $q^2 = 7,2$  és  $\alpha = 0,02; 0,04$  paraméterértékeknél határoztuk meg. A metszéspontokat, melyek meghatározzák az egyensúlyi atomi sugarak értékeit, kivetítettük a vízszintes tengelyre



környezetében minimumot mutat. A kísérleti görbéknek ez a karakterisztikus viselkedése a 4d és 5d sorozat esetén látszik világosan, ahol nem lépnek fel a mágnességgel kapcsolatos zavaró körülmények, amelyeket számításunkban teljesen elhanyagoltunk.

A karakterisztikus minimum reprodukálása mellett azonban a sorozat elején és végén az elméleti görbe lényegesen eltér a megfigyelt értékektől, amennyiben nö-



6. ábra. Az egyensúlyi atomi sugarak elméleti és kísérleti értékeinek összehasonlítása. Az elméleti értékeket (szaggatott vonal) az 5. ábra alapján kaptuk

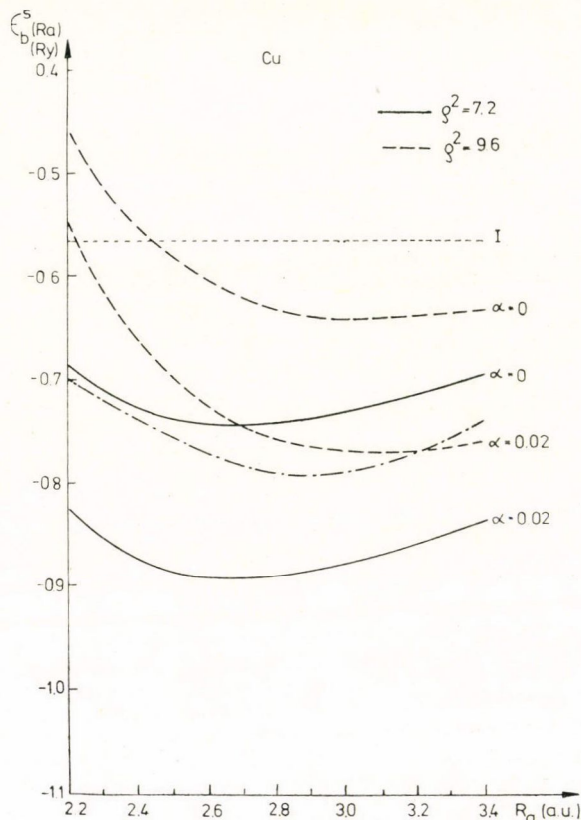
vekedése jóval meredekebb a kísérleti görbénél. (Ezért a sorozat első elemeire a számított értékeket nem tüntettük fel.) Az elméleti görbének ez a viselkedése első sorban annak a következménye, hogy ebben a közelítésben elhanyagoltuk az Ashcroft-sugár rendszámfüggését (az Ashcroft sugár a rendszám növekedésével csökken).

#### 1/d. Kohéziós energia

Az atomi sugarak ismeretében közelítő energiakifejezéseink, valamint a kísérleti ionizációs energiák felhasználásával meghatározhatjuk a sorozat elemeinek kohéziós energiáit ( $-E_c = E + I$ ).

Vizsgáljuk meg most a kohéziós energia különböző járulékait. A 7. ábra a rézre elvégzett Wigner—Seitz számítás eredményével [32] hasonlítja össze az s sáv aljának  $R_a$  függésére kapott eredményeinket a  $q^2$  és  $\alpha$  paraméterek különböző értékeinél.

$E^s + \frac{1}{2} E_{ii}$  értékét ezután a kinetikus, elektrosztatikus, kicserélődési és korrelációs energiatagok  $\varepsilon_b^s$ -hez történő hozzáadásával nyerjük. Az eredményeket réz esetében a 8. ábra mutatja, ahol feltüntettük az első ionizációs energia értékét is. Az ábrán látható teljes energiagörbe  $R_a \approx 3,4$  a. u.-nál veszi fel minimális értékét, ami lényegesen nagyobb a megfigyelt  $R_a = 2,67$  a. u. értéknél. Ez az eltérés — az előző fejezetben mondottak alapján — elsősorban annak a következménye, hogy az Ashcroft-sugár értékét az egész sorozatra állandónak tekintettük.

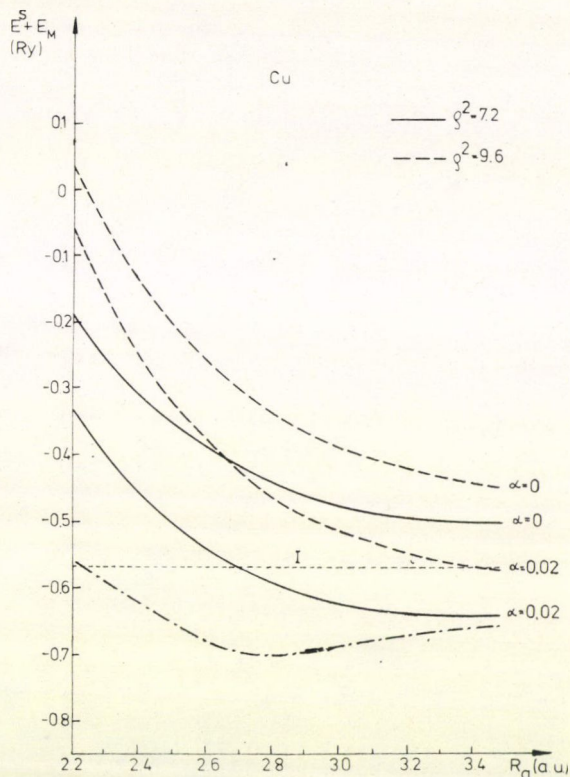


7. ábra. A réz s sáv aljának energiája  $R_a$  függvényében a  $q^2$  és  $\alpha$  paraméterek különböző értékeinél. Az ábrán feltüntettük Fuchs [32] Wigner—Seitz számításának eredményét is (eredményvonal). A pontozott vonal az  $I$  ionizációs energiát jelenti

A 9. ábrán az  $E^s + \frac{1}{2} E_{ii}$  és  $E_{BS}^d$  mennyiségeknek a megfigyelt atomi sugaraknál felvett értékeit láthatjuk a  $z_d$  betöltési szám függvényében. Az ábrán feltüntettük a 3d sorozat ionizációs energiáit is.



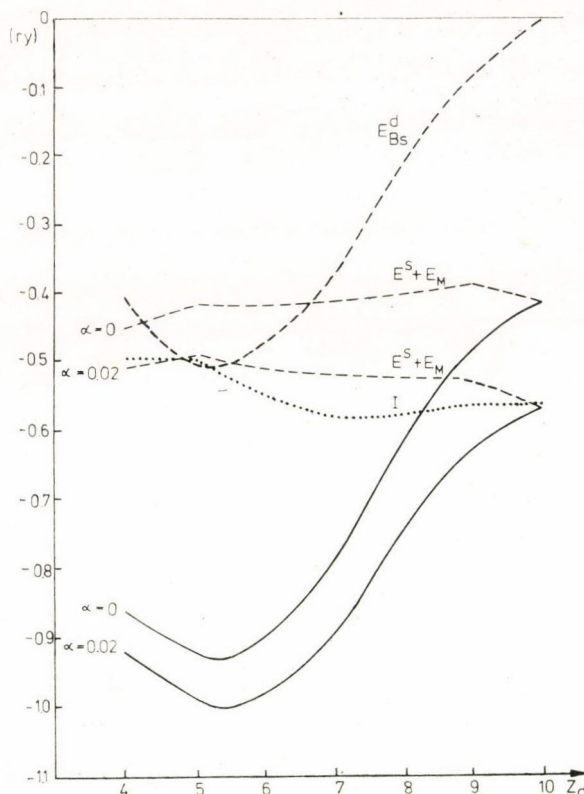
Végül a kohéziós energiákra kapott eredményeinket a 10. ábrán láthatjuk. Az ábrán a megfelelő kísérleti értékeket mind a három átmeneti fém-sorozat esetében ábrázoltuk. A kísérleti értékek a  $z_d=5$  betöltési szám körül maximális kohéziót mutatnak, amit az elméleti görbe — az előző számításokhoz hasonlóan [33], [34] — jól



8. ábra. A réz s energiája ( $E^S + E_M$ ) az atomi sugár függvényében a  $\rho^2$  és  $\alpha$  paraméterek különböző értékeinél, összehasonlítva Fuchs [32] megfelelő eredményével (eredményvonal). A pontozott vonal az ionizációs energiát jelenti

reprodukál. A sorozat végén azonban — az egyensúlyi atomi sugaraknak a megfigyeltnél nagyobb értékei következtében — a kohéziós energiákra kapott eredményeink jóval kisebbek a kísérleti értékeknél.

Számításunk további eredménye, hogy az atomi sugár, valamint a kohéziós energiagörbe szélsőértékei különböző helyeken vannak, jó egyezésben a tapasztalattal. Erről a 6. és 10. ábra összehasonlításával könnyen meggyőződhetünk. A szélsőérték-helyek fenti eltérése modellünkben a  $d$  sáv szélesség  $z_d$ -függésének a következménye, a merev-sáv modell használata esetén ugyanis a szélsőértékeket mindkét esetben ugyanazon a helyen kapnánk. A fentiek alapján tehát megállapíthatjuk, hogy a kohéziós tulajdonságok vizsgálatánál — bár a sáv szerkezet részletei nem lényegesek [33] — a sáv szélesség rendszámfüggését figyelembe kell vennünk.



9. ábra. A 3d sorozat teljes energiái a  $z_d$  betöltési szám függvényében (vastag vonal). Az s és d járulékokat szaggatott vonalakkal jelöltük ( $E^s$  számításánál  $\rho^2 = 7,2$ ). A pontozott vonal a vas-csoport elemeinek ionizációs energiáit jelenti

### 1/e. Kompresszibilitás

A kompresszibilitás egyensúlyi értékét a következő egyenlet határozza meg:

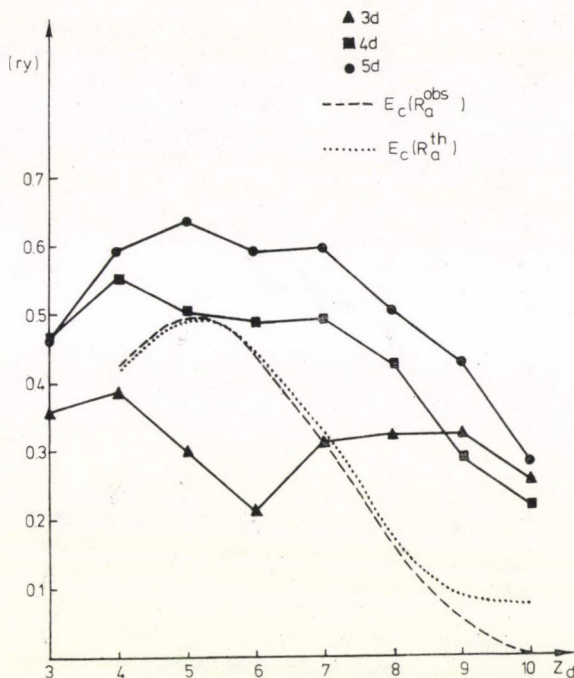
$$\frac{1}{\kappa} = B = \frac{1}{12\pi R_a} \frac{\partial^2 E}{\partial R_a^2}. \quad (\text{II.13})$$

A teljes energia  $R_a$ -függésének ismeretében (II.13) alapján közvetlenül megkaphatjuk a  $B$  térfogati modulus rendszámfüggését mutató 11. ábrát. Az ábra a térfogati modulusok elméleti értékeit hasonlítja össze a 3d és 4d sorozat megfelelő kísérleti értékeivel. A számításnál a 6. ábrán látható egyensúlyi atomi sugarakat használtuk.

A 11. ábra alapján megállapíthatjuk, hogy a térfogati modulus elméleti és kísérleti értékei között jelentős eltérés van. A következő fejezetben a különböző konfigurációjú állapotok vizsgálatánál látni fogjuk, hogy a számított és mért értékek közötti egyezés közelítéseink finomításával — a modell alapfeltevéseinek megvál-



toztatása nélkül — lényegesen javítható. A sorozat utolsó elemeinél azonban az ábrán megfigyelhető eltérés elsősorban annak következménye, hogy az (I.35) d energiában elhanyagoltuk azokat a tagokat, melyek egy effektív *törzs-törzs tasztítás* forrásai lehetnek, melynek figyelembevétele szükséges ahhoz, hogy kielégítően nagy



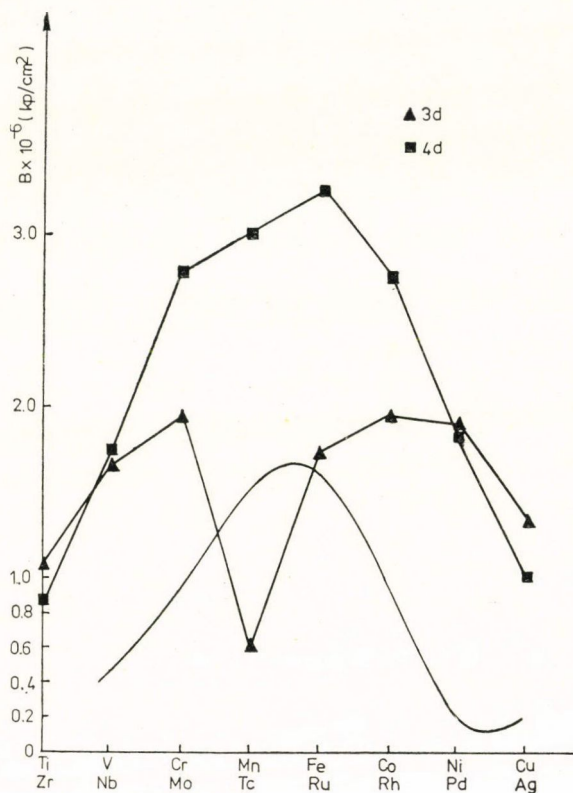
10. ábra. Az átmeneti fémek megfigyelt kohéziós energiáinak összehasonlítása az elméleti eredményekkel. Az elméleti értékeket a kísérleti (szaggatott vonal) és az elméleti (pontozott vonal) egyensúlyi atomi sugaraknál (ld. 6. ábra) határoztuk meg

térfogati modulust kapjunk a réz esetében [32], [37]. A nemesfémeknél a *törzs-törzs* tasztítást a legegyszerűbb formában egy Born—Mayer potenciál bevezetésével vehetnénk figyelembe [49], a nyílt d héjjal rendelkező átmeneti fémek esetében azonban a helyzet jóval bonyolultabb. Ezért ebben a fejezetben — a kohéziós tulajdonságok általános tendenciáinak tanulmányozásánál — nem foglalkozunk ezeknek a tagoknak a vizsgálatával; a réz kohéziójában játszott szerepüket a következő részben vizsgáljuk részletesen.

Eredményeinket röviden a következőkben foglalhatjuk össze. Modellünk, amelyben a d elektronokat a 'tight binding', az s elektronokat pedig a közel-szabad elektron közelítés segítségével írtuk le, az atomi sugár, a kohéziós energia és a térfogati modulus *rendszámfüggésének* leglényegesebb sajátosságait helyesen adja vissza. A modell — a d sáv középpontja és a d—d kölcsönhatás  $R_d$ -függésének elhanyagolása ellenére — nemcsak a fenti mennyiségek jellegzetes maximumait és minimumait reprodukálja, hanem a szélsőértékek *helyére* is a kísérletekkel összhangban levő eredményeket ad. A térfogati modulusokra azonban a sorozat végén levő elemeknél a

megfigyeltnél kisebb értékeket kaptunk, mivel ezeknél az elemeknél az elhanyagolt tagok szerepe megnő az energia magasabb deriváltjaiban.

Számításunk — az előző munkához hasonlóan [33], [34], [35], [37] — rámutat a d elektronok lényeges szerepére az átmeneti fémek teljes energiájának meghatározásában, de ugyanakkor hangsúlyozza az s sáv kohéziójának jelentőségét is a rács egyensúlyának kialakításában.



11. ábra. A térfogati modulus elméleti és kísérleti értékei. Az elméleti értékeket (II. 13) alapján, a 6. ábrán látható egyensúlyi atomi sugaraknál határoztuk meg. A kísérleti értékeket a 3d és 4d sorozatra ábrázoltuk

## 2. A konfiguráció szerepe a kohéziós és rugalmas tulajdonságokban. 3d és 4d sorozat

Az előző fejezetben tehát megmutattuk, hogy az átmeneti fémek kohéziós paramétereinek jellegzetes rendszámfüggése magyarázható, ha a sorozat minden elemére azonos,  $3d^n 4s$  konfigurációt tételezünk fel és az s energiát közel-szabad elektron, a d energiát pedig TB közelítés segítségével határozzuk meg. Ebben a fejezetben ezt a modellt fogjuk továbbfejleszteni, és így a fentitől eltérő konfigurációjú állapotok energiájának meghatározására is alkalmassá tesszük. Az így átalakított modell se-



gítségével a 3d és 4d sorozat esetében meg fogjuk vizsgálni, hogy a konfiguráció megváltozása milyen hatással van a kohéziós és rugalmas tulajdonságokra [3].

Az előző fejezethez hasonlóan a teljes energia meghatározásánál most is (I.37)-ből indultunk ki, az  $s$  energiát (I.38), a  $d$  energiát pedig (II.6) alapján határoztuk meg. A számításban (I.14) alapján most figyelembe vettük a másodrendű tagot is, hiszen  $z_s > 1$  esetén járulékaik már a kohéziós és rugalmas állandók közelítő meghatározásánál sem hanyagolhatók el. A teljes energia tehát a következő alakú (a jobb áttekinthetőség kedvéért az egyes energia-tagokat újból felírjuk együtt:  $E = E^s + E^d + \frac{1}{2} E_{ii}$

$$E^s = \frac{2,21 z_s^{5/3}}{R_a^2} \lambda_0 - \frac{0,916 z_s^{4/3}}{R_a} + E_{\text{corr}} + E_1^s + E_s^2$$

$$E^d = 120A(z_d)I(z_d, R_{nn}) \quad (\text{II.14})$$

$E_1^s$ -t (I.31) alapján határozhatjuk meg,  $\lambda_0$ -t pedig (I.19) definiálja az  $R_c^{(1)}$  paraméter felhasználásával. Ha a  $d$  energiában fellépő  $I$  átfedési integrált (II.2)-nek megfelelően  $\gamma I_0$  alakban vesszük fel, három paraméter,  $R_c^{(1)}$ ,  $R_c^{(2)}$  és  $\gamma$  segítségével előállítottuk egy  $z_s$   $s$  elektront és  $z_d$   $d$  elektront tartalmazó átmeneti fém teljes energiáját. Vizsgáljuk most meg, hogyan határozhatjuk meg a paraméterek értékeit. Az I.1 fejezetben már említettük, hogy az „ortogonalitási lyuk” korrekciót elhanyagolva ( $\lambda_0 = 1$ ) az (I.21) energia kifejezés (ami a  $z_d = 0$  esetben (II.14)-gyel egyenlő) számos fém, köztük az átmeneti fém-sorozatok elején levő elemek kohéziós állandóira is kielégítő eredményeket ad a paraméterek  $R_c^{(1)} = R_p$  és  $R_c^{(2)} = 0,86 R_c^{(1)}$  értéke mellett [4], [5], [6]. ( $R_p$  a Pauling sugár). Szintén ebben a fejezetben mutattuk meg néhány egyszerű fém esetében, hogy abban az esetben, ha  $\lambda_0$ -t (I.19) alapján határozzuk meg, a  $R_c^{(1)} = 1,2 R_p$  és a  $R_c^{(2)} = 0,66 R_c^{(1)}$  paraméter-választás szükséges ahhoz, hogy megfelelő eredményeket kapjunk a kohéziós állandókra. Vizsgáljuk most meg, hogy ebben az utóbbi modellben milyen paraméter-értékek szükségesek a 3d és 4d sorozat elején levő fémek kohéziós tulajdonságainak megfelelő leírásához. Az  $R_c^{(1)}$  és  $R_c^{(2)}$  paramétereket most is  $R_a$  és  $B$  egyensúlyi értékeihez illesztettük. A számítások eredményét a IV. táblázatban foglaltuk össze, ahol feltüntettük a teljes energiára kapott eredményeinket is a kísérleti értékekkel együtt. A számítást most is a megfigyelt kristály-szerkezetek fel-

IV. TÁBLÁZAT

Vegyérték	$R_c^{(1)}$ [a. u.]	$\mu = R_c^{(1)}/R_p$	$\nu = R_c^{(2)}/R_c^{(1)}$	$E$ [ry]	$E_{\text{mgsf.}}$ [ry]
3d sorozat					
Sc 3	1,961	(1,28)	0,6797	-3,64	-3,50
Ti 4	1,572	(1,21)	0,6923	-7,17	-7,05
V 5	1,352	(1,22)	0,7020	-12,14	-12,42
Cr <sup>+</sup> 6	1,180	(1,20)	0,7063	-18,90	-20,01
4d sorozat					
Y 3	2,177	(1,23)	0,6483	-3,41	-3,19
Zr 4	1,859	(1,23)	0,6595	-6,53	-6,14
Nb 5	1,675	(1,27)	0,6658	-10,82	-10,45
Mo 6	1,566	(1,33)	0,6619	-16,26	-17,11

\*Króm esetén a paraméter-értékek vizsgált tartományában  $R_a$  és  $B$  egyidejű illesztése nem volt lehetséges, így a  $\mu = 1,2$  választás mellett  $\nu$  értékét illesztettük az egyensúlyi atomi sugárhoz.



használásával végeztük el. A táblázatból látható, hogy a 3d és 4d sorozat elején levő fémekre kapott paraméterértékek közel fekszenek az egyszerű fémekre megállapított  $\mu = \frac{R_c^{(1)}}{R_p} = 1,2$ ;  $\nu = \frac{R_c^{(2)}}{R_c^{(1)}} = 0,66$  átlagos értékekhez,  $z_s = 6$  esetén azonban ez már kevésbé jól teljesül (a krómnál  $R_a$  és  $B$  egyidejű illesztését nem lehetett elvégezni). A teljes energiára kapott eredményeink jól egyeznek a megfigyelt értékekkel, bár Cr és Mo esetén most is kevésbé jó egyezést kaptunk.

Összefoglalva tehát megállapíthatjuk, hogy az s energiában (ez alatt most a közel-szabad s, p elektronok energiáját értjük) szereplő  $R_c^{(1)}$  és  $R_c^{(2)}$  paramétereknek az  $R_c^{(1)} = 1,2 R_p$  és  $R_c^{(2)} = 0,66 R_c^{(1)}$  választása megfelelő közelítésnek látszik a kohéziós tulajdonságok leírása szempontjából. Számításaink továbbá azt mutatják, hogy az átmeneti fém sorozatok elején levő elemek a kohéziós jellemzők meghatározása szempontjából egyszerű fémként kezelhetők, azaz a *maximális* kémiai *vegyértékkel* egyenlő számú közel-szabad elektront tartalmazó modell segítségével jó közelítésben leírhatók.

Az s energiában szereplő paraméterek értékét tehát  $\mu = 1,2$  és  $\nu = 0,66$  segítségével, az ion-sugarak ismeretében meghatározhatjuk. Különböző konfigurációjú állapotok vizsgálatánál tehát tudnunk kell az ion sugarak értékét különböző ionizációs fok esetén. Mivel ezek általában nem ismertek, értéküket a következő egyszerű modell segítségével határoztuk meg: Rendelkezésünkre állnak a Pauling-sugarak értékei az átmeneti fém-sorozatok első néhány elemére ( $z_s = 6$ -ig) a maximális vegyértékű állapotok jellemzésére. Ezen kívül — az atomi hullámfüggvények ismeretében — (I.20) alapján meghatározhatjuk  $R_c$  értékeit az atomban. A számításnál csak a 3s (ill. a 4d sorozat esetében a 4s) pályák hatását vettük figyelembe, mivel a belső s pályák járuléka esetünkben elhanyagolható. A számítást a 3d sorozatra a Függelékben meghatározott közelítő hullámfüggvények segítségével végeztük el (3d<sup>n</sup>4s konfiguráció feltételezésével), a 4d sorozat esetében pedig *Richardson et al.* [66] hullámfüggvényeit használtuk (a szerzők a hullámfüggvényeket 4d<sup>n</sup> konfigurációjú, egyszer ionizált állapotban határozták meg, mi azonban — feltételezve, hogy a külső s elektronok nem árnyékolják a belsőket — ezt az atomi esettel azonosítottuk).  $R_c$ -nek a 3d sorozatra meghatározott értékeit a 24. ábrán láthatjuk. A fenti adatok ismeretében egy tetszőleges ionizációs fokú állapot ionsugarát a következő módon határoztuk meg: Lineáris (az atomok esetében jól ismert Slater-szabálynak megfelelő) árnyékolást feltételezve a 3s, p, ill. 4s, p héjra ható átlagos „effektív töltés”-t a következő alakba írhatjuk:

$$z_{\text{eff}} = A + z_s + (1 - \sigma_d)z_d.$$

Itt az  $A$  állandó a belső pályák árnyékolását veszi figyelembe,  $\sigma_d$  pedig a d elektronok árnyékolását írja le. Az ion-sugarakat (a 3s, p, ill. 4s, p pályák sugarát)  $z_{\text{eff}}$ -el fordítottan arányosnak tételezzük fel. A fentiek alapján tehát az (I.20) kifejezésből számolt atomi sugarakat (itt  $z_s = 1$ )  $\bar{\alpha}/z_{\text{eff}}$ , a Pauling sugarak (itt  $z_d = 0$ ) rendszámfüggését pedig  $\alpha/z_{\text{eff}}$  alakban feltételezve meghatározhatjuk egy adott fém ion-sugarát tetszőleges  $z_s$  ionizációs fok esetén. A kapott eredményeink:

$$\begin{aligned} \text{3d sorozat} \quad R_c &= \frac{8,239}{2,381 + 0,2445z_d + z_s} \\ \text{4d sorozat} \quad R_c &= \frac{10,548}{3,000 + 0,2265z_d + z_s} \end{aligned} \quad (\text{II.15})$$



A fenti összefüggéseket a következő adatok felhasználásával kaptuk:

	Pauling sugár		Ion-sugár (I.20 alapján)	
3d sorozat	Sc	1,531	Sc	1,912
	Cr	0,983	Cu	1,270
4d sorozat	Y	1,758	Y	2,247
	Mo	1,172	Ag	1,597

(a fenti ion-sugarakat a. u.-ban mérjük.)

A 12. és 13. ábrán az ionsugaraknak a fenti módon meghatározott értékeit tüntettük fel a hozzáférhető mért (vagy más módon számolt) értékekkel együtt különböző ionizációs fok esetén a 3d és 4d sorozat elemeire. Az összehasonlítás azt mutatja, hogy a (II.15) alapján meghatározott  $R_c$  értékek elfogadhatók az ion-sugarak mértékéül.

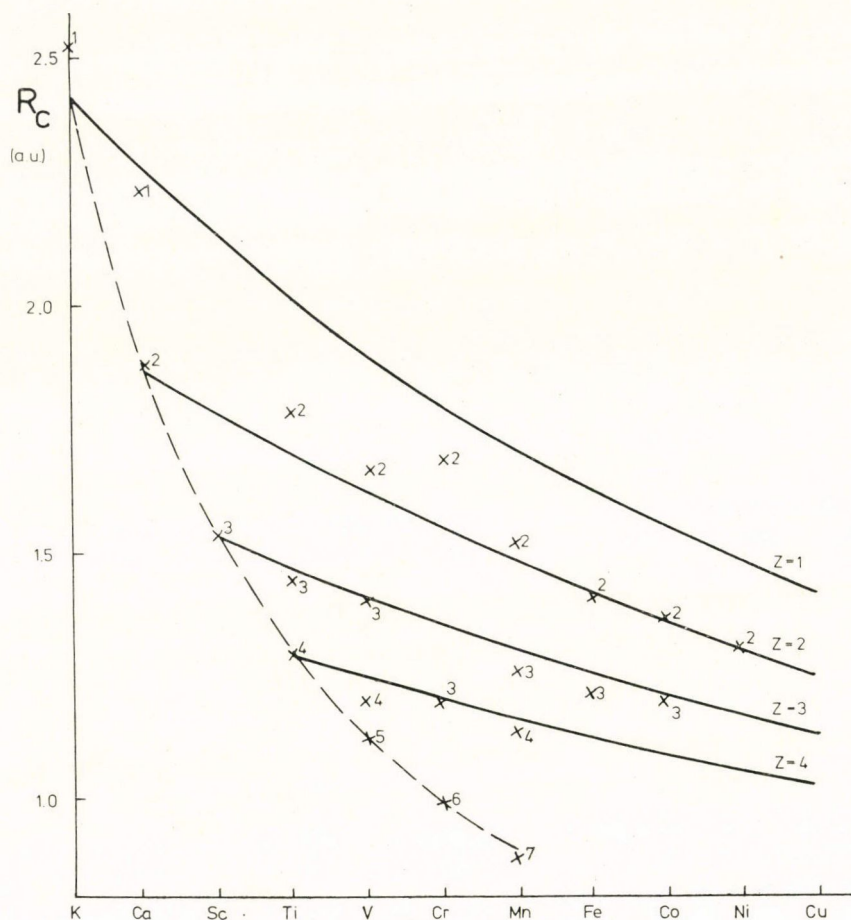
Az energia s-résznének kiszámításánál szükségünk van még az (I.31-ben) definiált  $z_{\text{eff}}^s$  effektív töltés, azaz  $E_{ee}^{sd}$  meghatározására is. Az s—d kölcsönhatás modellünkben a következő közelítések segítségével határoztuk meg: az s elektron-állapotokra — egy OPW állapot közelítéseként — olyan sűrűség-eloszlást tételeztünk fel, amely homogén az ion-törzsön (azaz  $R_c$ -n) kívül és nulla azon belül. Megjegyezzük, hogy a réz esetében elvégeztük a számítást tényleges OPW állapotok felhasználásával is, és hasonló eredményeket kaptunk. A fémekben a d állapotokat atomi hullámfüggvények felhasználásával, a „renormált atom” modell [39] alapján határoztuk meg, azaz az atomi hullámfüggvények normálási tényezőjét úgy határoztuk meg, hogy az atomi gömbbe  $z_d$  d-elektron jusson. Az atomi d állapotok leírására a 3d sorozatnál a Függelék 2. fejezetében meghatározott, a 4d sorozat esetén pedig *Richardson et al.* [66] által megadott analitikus hullámfüggvényeket használtuk. Így  $z_{\text{eff}}^s$ -t

$$z_{\text{eff}}^s = z_s + \alpha z_d \quad (\text{II.16})$$

alakba írhatjuk, ahol  $\alpha$  általában függ  $R_c$ -től és  $R_a$ -tól. Számításaink azonban azt mutatták, hogy  $z_{\text{eff}}^s$  mint  $R_a$  függvénye közel stacionárius az egyensúlyi atomi sugarak környezetében, azaz jó közelítéssel állandónak tekinthető. Könnyen megérthető, hogy az s elektronokra ható effektív töltés miért maximális abban a tartományban, ahol a d-pályák átfedése kezd lényegessé válni. Nagyobb  $R_a$  értékeknél ugyanis  $z_{\text{eff}}^s$  egyhez tart, kisebb atomi sugaraknál pedig a d elektronok árnyékolása ismét teljesebb lesz az OPW-alakú s sűrűség és a d elektronok nyomás alatti átrendeződése következtében. Így ebben a fejezetben elhanyagoljuk  $z_{\text{eff}}^s$   $R_a$ -függését; az effektív töltés  $R_a$ -függésének hatását a rugalmas állandókra a dolgozat II. részének 2. fejezetében vizsgáljuk meg a nemesfémek esetében. Az *V. táblázatban* példaként feltüntetettük  $\alpha$  értékét néhány átmeneti fém esetén. Ez az érték számításunkban általában 0,006 és 0,06 között mozog.

Az s energiában hátra van még a másodrendű tag meghatározása.  $E_2^s$ -t az (I.14) kifejezés alapján (I.24) alakú Ashcroft potenciál feltételezésével határoztuk meg, amelyben most  $z_{\text{eff}}^s$  szerepel ion-töltésként

$$V(|\mathbf{G}|) = -\frac{8\pi z_{\text{eff}}^s}{\Omega_0 |\mathbf{G}|^2} \cos |\mathbf{G}| R_c^{(2)}. \quad (\text{II.17})$$



12. ábra. Az ion-sugarak (II.15) alapján számolt elméleti (vastag vonal) és kísérleti értékeinek összehasonlítása a 3d sorozatra. Az elméleti görbék és kísérleti pontok melletti számok az ionizáció fokát jelentik. A kísérleti (vagy más módon számolt) értékeket Handbook of Chem. Phys.-ből vettük, a sorozat elején maximális ionizáció esetén a Pauling sugarakat használtuk (szaggatott vonal)

Előállítottuk tehát egy adott átmeneti fém esetében a teljes energia s részét tetszőleges  $(z_s, z_d)$  konfigurációjú állapotokra.  $z_{\text{eff}}^s$  értékét a fent leírt módon, az  $R_c^{(1)}$  és  $R_c^{(2)}$  paraméterek értékét pedig az

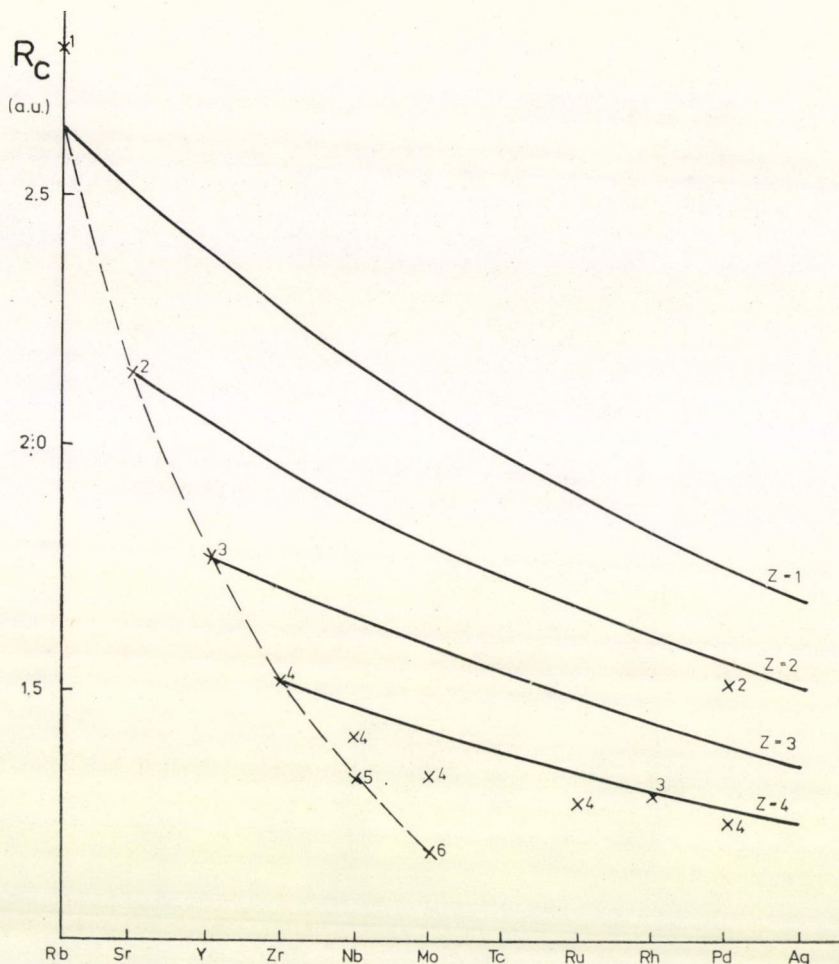
$$R_c^{(1)} = 1,2R_c (= R_p)$$

$$R_c^{(2)} = 0,66R_c^{(1)} \quad (\text{II.18})$$

arányosságok felhasználásával határozzuk meg, ahol  $R_c$ -t (II.15) alapján számítjuk ki.

A d energiát az előző fejezetben elvégzett számításokhoz hasonlóan a TB sáv-energiával közelítettük. Az  $I(z_d, R_m)$  átfedési integrál meghatározásánál azonban eltértünk az előző fejezet közelítéseitől, a potenciál (II.3) alatti „ad hoc” feltételezés-





13. ábra. Az ion-sugarak (II.15) alapján számolt elméleti (vastag vonal) és kísérleti értékeinek összehasonlítása a 4d sorozatra. Az elméleti görbék és kísérleti pontok melletti számok az ionizáció fokát jelentik. A kísérleti (vagy más módon számolt) értékeket Handbook of Chem. Phys. (1971—72)-ből vettük, a sorozat elején maximális ionizáció esetén a Pauling-sugarakat használtuk (szaggatott vonal)

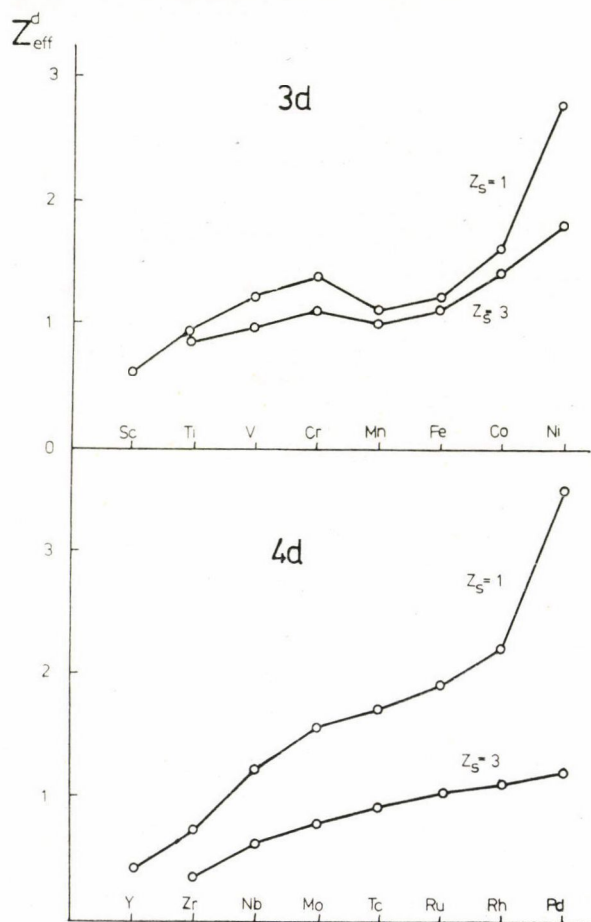
sétől, és ezután a sáv szélességhez történő bizonytalan illesztéstől. (Amennyiben közelítéseink a tényleges fizikai tartalmat ragadják meg, továbbra is várható  $I$  közelítő arányossága a sáv szélességgel.) Az átfedési integrált most a következő módon határoztuk meg: Howland [67] mutatta meg, hogy egy kétcentrumos,  $1/r$  alakú potenciált tartalmazó átfedési integrált közelítőleg kiszámíthatunk a hullámfüggvények közötti átfedés ismeretében:

$$\int \Phi^*(\mathbf{r}) \frac{1}{r} \Phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) d\mathbf{r} \sim \frac{1}{R} \int \Phi^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) d\mathbf{r}$$

ahol  $R$  a két centrum távolsága. Ennek felhasználásával  $I$ -t az

$$I = \gamma I_0 = \frac{2z_{\text{eff}}^d}{R_{nn}} \int \Phi_d^*(\mathbf{r}) \Phi_d(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{nn}) d\mathbf{r} \quad (\text{II.19})$$

kifejezéssel közelíthetjük. A hullámfüggvények közötti átfedési integrál kiszámításánál a 3d sorozat esetén a Függelék 2. fejezetében meghatározott — *Herman és Skilman* [68] numerikus függvényeihez illesztett — analitikus hullámfüggvényeket használtuk, a 4d sorozatra pedig Richardson et al. [66] négy exponenciálisból álló közelítő hullámfüggvényeit. A fenti közelítés láthatóan rokon a molekulafizikában rendkívül gyakran alkalmazott Hückel módszerrel, amely Hamilton operátor mátrix-elemeit arányosnak tételezi fel az átfedési mátrixelemekkel.

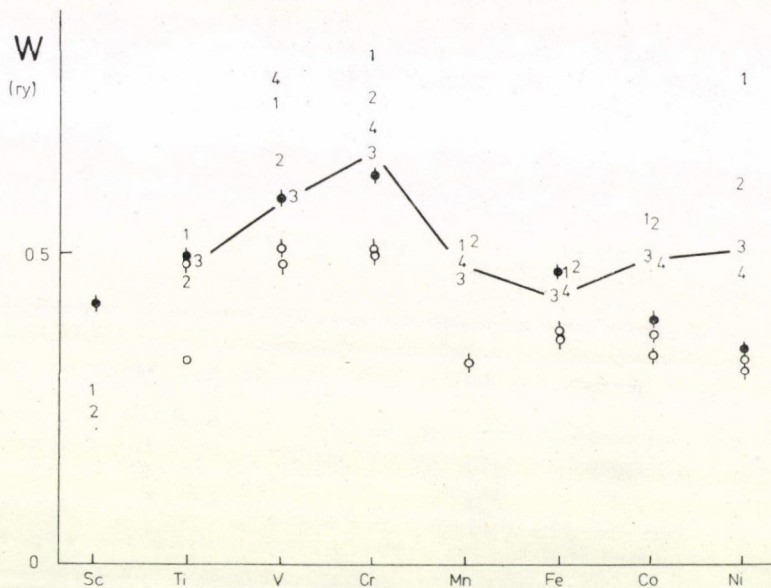


14. ábra. Az átfedési integrál (II.19) alatti kifejezésében fellépő  $z_{\text{eff}}^d$  paraméternek a megfigyelt egyensúlyi atomi sugarakhoz illesztett értékei a 3d és 4d sorozatra. Az ábrán a  $z_s = 1$  és  $z_s = 3$  eseteket tüntettük fel



$z_{\text{eff}}^d$  értékét az egyensúlyi atomi sugárhoz történő illesztéssel határoztuk meg a (II.14) energia kifejezése alapján. Az így kapott értékek a 14. ábrán láthatók a 3d és 4d sorozatra  $z_s=1$  és  $z_s=3$  esetén. Az ábrán látható tendencia összhangban van  $z_{\text{eff}}^d$ -nek a (II.19) definíció alapján elvárt értelmezésével, mivel a d elektronokra ható átlagos töltésnek megfelelően a rendszám növekedésével nő, sőt a  $z_s=3$  konfiguráció feltételezése esetén a függés közel lineáris (a  $z_s=3$  konfigurációjú állapotokra kapott eredményeket azért tüntettük fel, mivel a legtöbb átmeneti fém rendelkezik hármass vegyértékkel).

A 15. ábrán láthatjuk a sávszélességekre kapott eredményeinket a 3d sorozat esetében. A sorozat minden eleménél két különböző konfigurációjú állapotra kapott



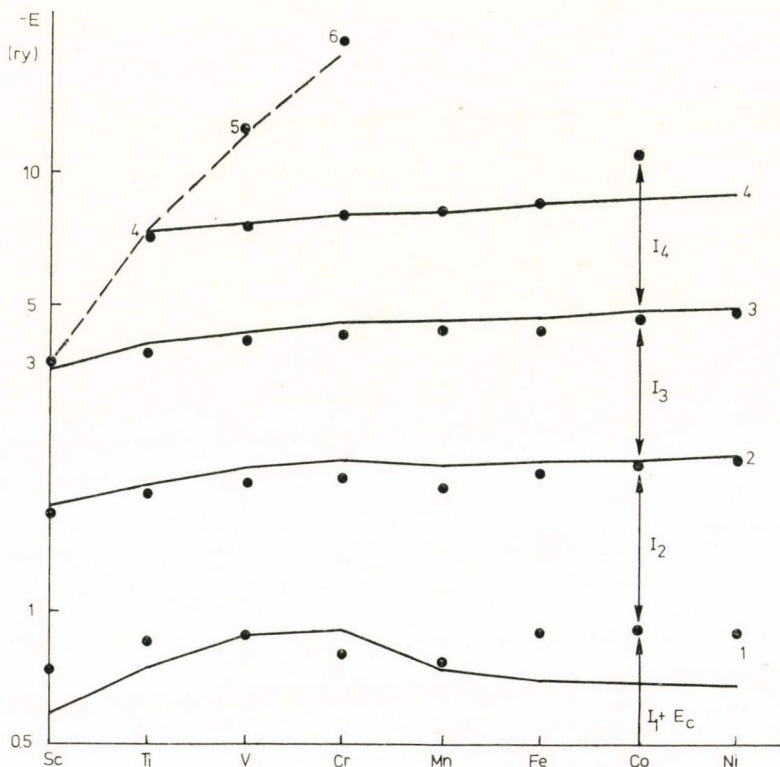
15. ábra. A d sávszélességekre kapott eredményeink összehasonlítása más számítások eredményeivel. Az ábrán feltüntettük Hodges et al. [64] által, a renormált atom modell felhasználásával kapott értékeit (●), valamint néhány APW számítás eredményét [64], [63], [Mattheiss L. F. Phys. Rev. 134 A970, 1964] (○). Modellünk eredményeit jelentő számok  $z_s$  értékeit mutatják. Az ábrán összekötöttük a legnagyobb kémiai vegyértéknek (melynél a modell még tartalmaz d elektronokat) megfelelő értékeket

értéket tüntettünk fel; az egyik esetben egy s elektront tételeztünk fel atomonként, a másik esetben az s elektronok számát a maximális vegyértékkel egyenlőnek vettük (a sorozat elején a második legnagyobb vegyértéket használtuk, mivel a maximális vegyérték feltételezése esetén a modell nem tartalmaz d elektronokat). A sávszélességet — (II.9)-nek megfelelően — a  $W=16I$  kifejezés segítségével határoztuk meg. Eredményeink a maximális kémiai valencia feltételezése esetén összhangban vannak a sávszerkezet-számítások segítségével kapott sávszélesség értékekkel. Ez azt mutatja, hogy modellünk tartalmazza a fizikai kép leglényegesebb elemeit, hiszen teljesen

független módon — az egyensúlyi atomi sugarak illesztésével — meghatározott paraméter-értékek jó sávszélességekre vezettek.

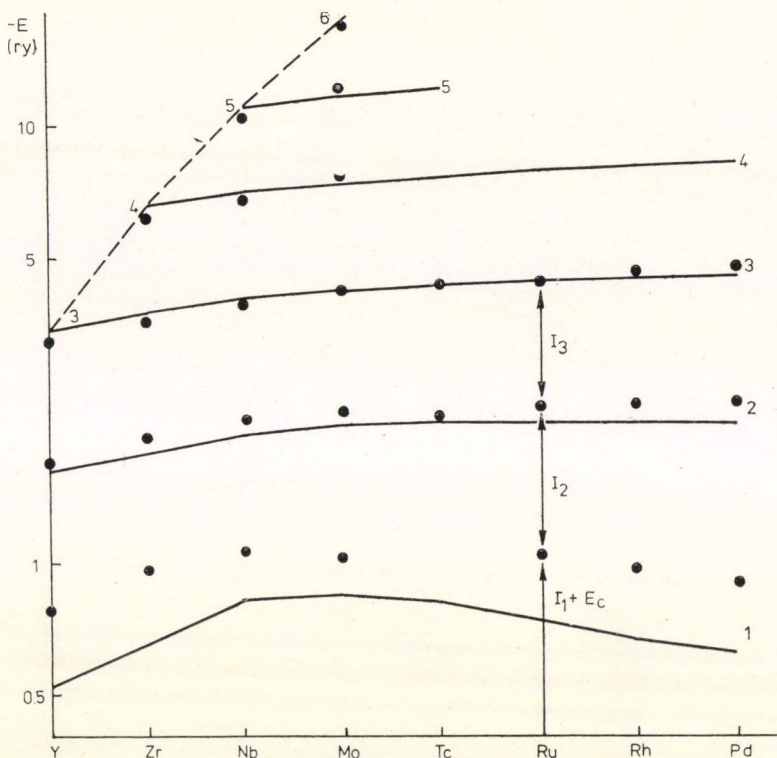
Ezután térjünk rá a kohéziós és rugalmas paraméterek vizsgálatára  $z_s$  és  $z_d$  különböző értékei mellett. Modellünkben a (II.19)-ben megadott átfedési integrál együtthatóját tehát az egyensúlyi atomi sugár értékéhez illesztettük. Ha a  $z_d=0$  esetet vizsgáljuk, a  $v=R_c^{(2)}/R_c^{(1)}$  arányt változtatjuk meg úgy, hogy visszkapjuk az egyensúlyi atomi sugár megfigyelt értékét (az így kapott értékek is 0,66 körül mozognak.) Számításunk tehát minden esetben egy szabad paramétert tartalmaz, melyet az egyensúlyi atomi sugárhoz illesztettünk.

Tekintsük át most a 3d és 4d sorozatra kapott eredményeinket. A 16. és 17. ábrán a teljes energia értékeit láthatjuk a két átmeneti fém sorozatra különböző konfigurációjú állapotok feltételezése mellett (az elméleti görbék melletti számok az s elektronok számát jelentik). Az ábráról látható, hogy modellünk eredményei általában jól egyeznek a kísérleti értékekkel. Kivételt képez talán a  $z_s=1$  eset, ahol az egyezés kissé rosszabb.



16. ábra. A teljes energia elméleti és kísérleti (●) értékeinek összehasonlítása a 3d sorozatra különböző konfigurációk esetén. A számokkal jelzett elméleti görbéket (vastag vonal) atomonként  $z_s$  számú közel-szabad elektron feltételezésével kaptuk. A megfelelő kísérleti értékeket az első  $z_s$  ionizációs energia és a szublimációs hő ( $E_c$ ) mért értékének összegével azonosítottuk. A sorozat elején a maximális kémiai vegyértéknek megfelelő elméleti értékeket szaggatott vonallal jelöltük

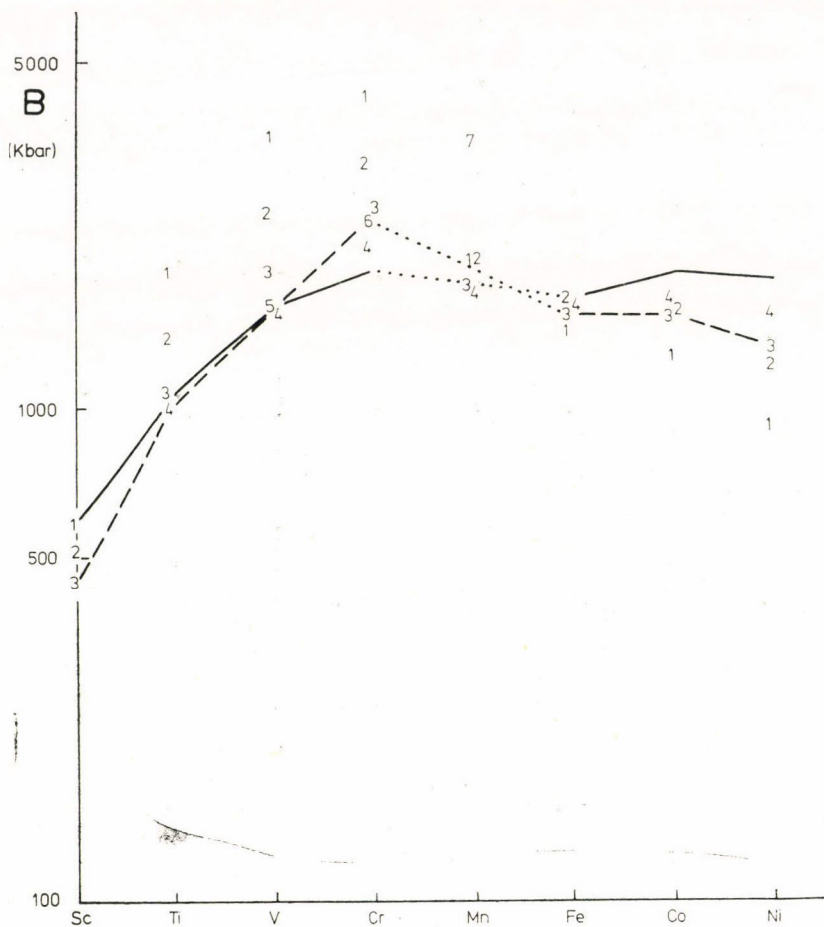




17. ábra. A teljes energia elméleti és kísérleti (●) értékeinek összehasonlítása a 4d sorozatra különböző konfigurációk esetén. A számokkal jelzett elméleti görbék (vastag vonal) atomonként  $z_s$  számú közel-szabad elektron feltételezésével kaptuk. A megfelelő kísérleti értékeket az első  $z_s$  ionizációs energia és a szublimációs hő ( $E_c$ ) mért értékek összegeként azonosítottuk. A sorozat elején a maximális kémiai vegyértéknek megfelelő elméleti értékeket szaggatott vonallal jelöltük

A 18. és 19. ábrán a térfogati modulus számolt és mért értékeit hasonlítjuk össze a 3d és 4d sorozat esetében. Az ábrán az elméleti értékeket jelentő számok most is az  $s$  elektronok számát mutatják. Eredményeink azt mutatják, hogy a maximális vegyértékkel egyenlő számú  $s$  elektron feltételezésével kapott értékek összhangban vannak a kísérleti eredményekkel, míg  $z_s = 1$  esetén néhány fémnél lényegesen eltérnek a mért értékektől. Megfigyelhetjük továbbá, hogy a sorozat végén levő elemeknél az elméleti értékek bármely konfigurációban kicsit kisebbek, mint a térfogati modulusok megfigyelt értékei. Ez annak a következménye, hogy számításunkban elhanyagoltuk a „közel zárt”  $d$  héjak közötti kölcsönhatást, ami a nemesfémek zárt  $d$  héjai esetében meghatározó jelentőségű a térfogati modulus kialakításában.

A 20. ábrán a térfogati modulus nyomás szerinti deriváltjának elméleti és kísérleti értékeit tüntettük fel a 3d és 4d sorozat elemeire. Az ábra alapján a kísérleti értékek bizonytalansága következtében (néhány esetben feltüntettük a különböző mérések eredményeit) csak annyit állapíthatunk meg, hogy az elméleti értékek (a



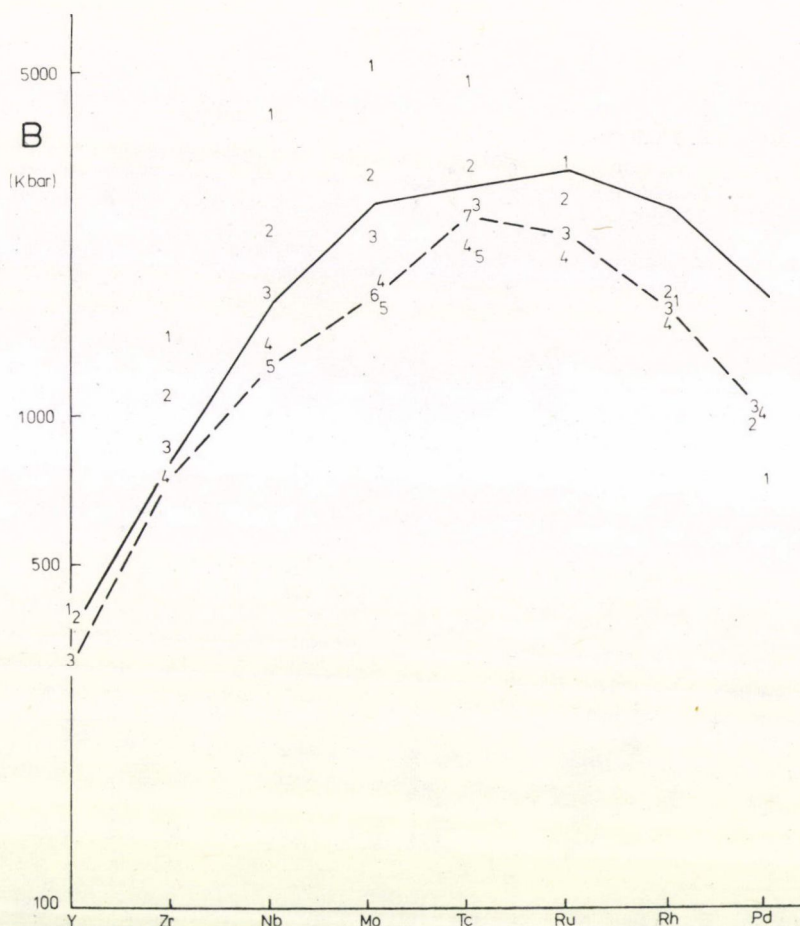
18. ábra. A térfogati modulus megfigyelt értékeinek összehasonlítása a különböző konfigurációk feltételezésével számított értékekkel a 3d sorozatra. Az elméleti értékeket jelentő számok az s elektronok számát mutatják. Az ábrán a kísérleti értékeket (vastag vonal) és a maximális vegyértékhez tartozó elméleti értékeket (szaggatott vonal) összekötöttük. A mangánnak a fenti tendenciától eltérő, anómá-

lisan kicsi térfogati modulusát •-val jelöltük

számok ismét az s elektronok számát jelentik) azonos nagyságrendben vannak a kísérletek eredményeivel.

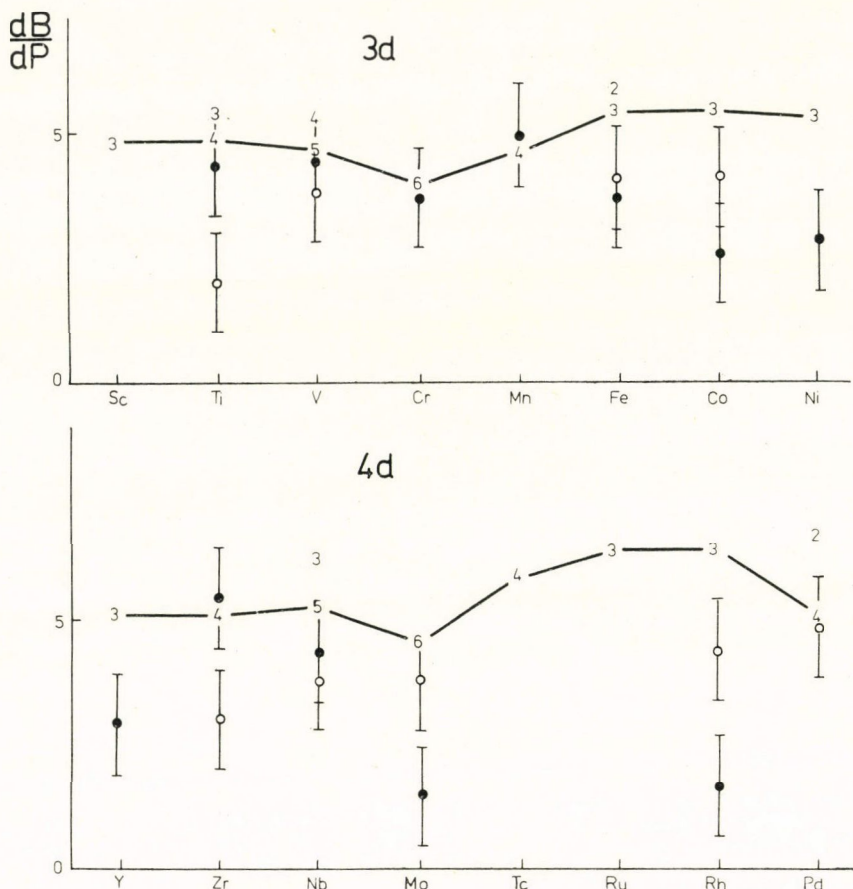
A 21. ábrán példaként a Ti és V állapotegyenletére kapott eredményeinket hasonlítjuk össze Keeler és Kennedy [69], valamint Altshuler et al. [70] méréseivel. Az ábrán feltüntetett elméleti görbéket mindkét esetben a maximális kémiai vegyértéknek megfelelő konfiguráció feltételezésével határoztuk meg (Ti és V esetén  $z_s=4$ , ill. 5), azaz mindkét fémeket egyszerű fémként kezeltük. Bármely más konfiguráció feltételezése a megfigyelnél jóval „keményebb” állapot-egyenletet eredményez.





19. ábra. A térfogati modulus megfigyelt értékeinek összehasonlítása a különböző konfigurációk feltételezésével számított értékekkel a 4d sorozatra. Az elméleti értékeket jelentő számok az s elektronok számát mutatják. Az ábrán a kísérleti értékeket (vastag vonal) és a maximális vegyértékhez tartozó elméleti értékeket (szaggatott vonal) összeköttöttük

Végül a köbös átmeneti fémek esetében meghatároztuk a nyírási rugalmas állandók értékét is, melyeket az *V. táblázatban* gyűjtöttünk össze. Az energia s részéből származó tagokat az egyszerű fémekhez hasonlóan számítottuk ki, a d energiát pedig párerők összegének tekintettük. Így az eredmények értékelése előtt meg kell jegyezni a következőket: az s energia-részben a Madelung-energia és a másodrendű tag ad járulékot, ennek az utóbbinak az értéke pedig erősen függ a pseudopotenciál konkrét alakjától. Így a (II.17)-ben adott rendkívül egyszerű alakú egyparaméteres Ashcroft-potenciál használata esetén nem várhatunk pontos egyezést a kísérleti értékkel. Ezen kívül a nyírási rugalmas állandók meghatározásánál számításunkban további közelítést jelent a d-járulékok meghatározási módja is, mivel ebben az eset-

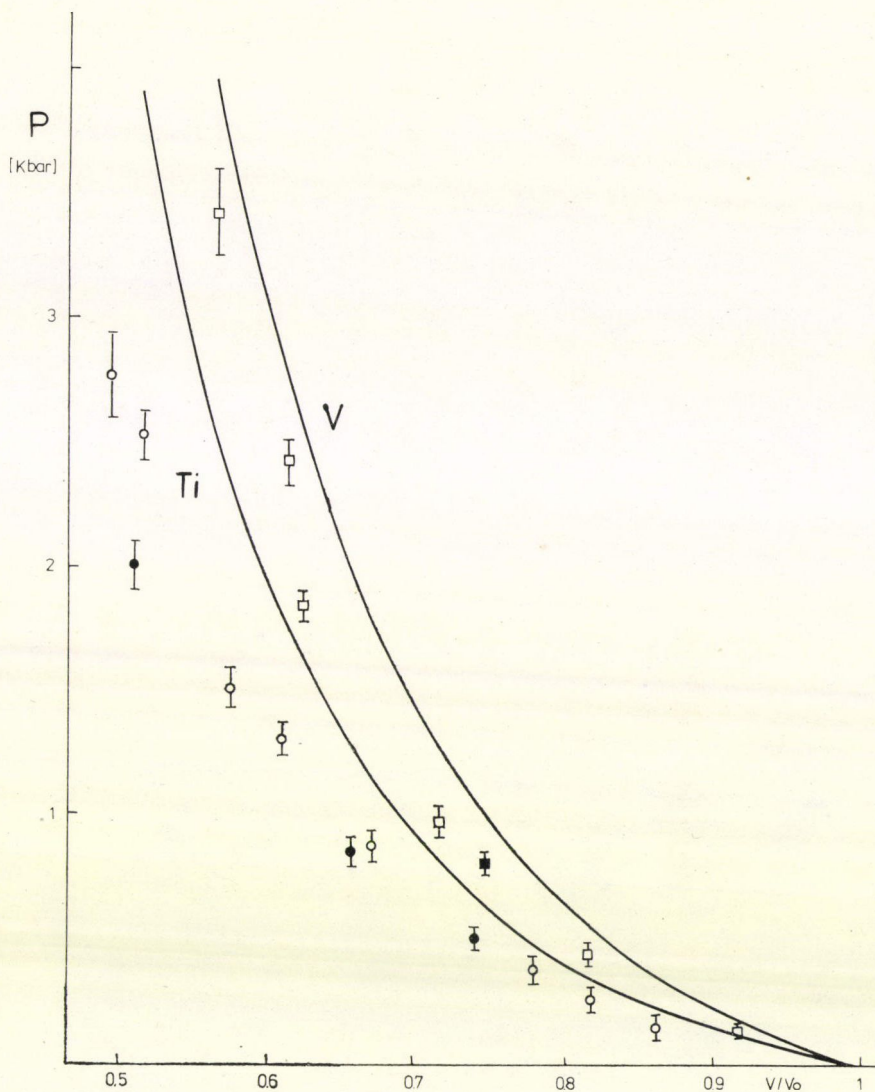


20. ábra. A térfogati modulus nyomás szerinti deriváltjának elméleti és kísérleti értékei a 3d és 4d sorozatra. Az elméleti értékeket jelentő számok az s elektronok számát mutatják. Az ábrán összekötöttük a maximális vegyértékhez tartozó elméleti értékeket. A kísérleti eredmények közül

Gschneidner [38] (●) és Grover et al. (Phys. Rev. B7 567, 1973] (○) értékeit tüntettük fel

ben a teljes d energiát párerők összegének tekintettük. A fentiek alapján tehát a számolt és megfigyelt értékek között legfeljebb nagyságrendi egyezést várhatunk. A táblázatban látható elméleti értékek — a V és Nb esetében megfigyelhető feltűnően jó egyezésen kívül — valóban általában nem egyeznek jól a rugalmas állandók mért értékeivel. Gyakran negatív eredményeket kaptunk, ami azt jelenti, hogy a feltételezett modellben a rács instabil a megfelelő nyírási deformációra. Az eredményeket vizsgálva azonban most is megállapíthatjuk, hogy a maximális vegyértéknek megfelelő (vagy annak közelében levő) állapotokra kaptuk a legjobb eredményeket. Ezt nemcsak a vanádium és nióbium példája bizonyítja; ezeknél a konfigurációknál általában minden fémnél stabil rácsot kaptunk.





21. ábra. A titán és vanádium állapotegyenletére kapott eredményeink összehasonlítása Altshuler et al. [70] (○ □), valamint Keeler és Kennedy [69] (● ■) méréseivel. A számításnál a maximális kémiai vegyértéknek megfelelő számú s elektront tételeztünk fel. A titán esetében a kísérleti pontokat ○-val a vanádiumnál □-gel jelöltük

Eredményeinket összefoglalva megállapíthatjuk, hogy elméleti modellünk általában a *maximális vegyértéknek* megfelelő konfigurációjú állapotok feltételezésével reprodukálja legjobban a kohéziós jellemzők megfigyelt értékeit. Ezt a nyírási rugalmas állandókra kapott eredményeink is alátámasztják. Az átmeneti fémso-

## V. TÁBLÁZAT

## V/a 3d sorozat

A  $C$  és  $C'$  nyírási rugalmas állandók különböző konfigurációk feltételezésével számított és mért értékei a 3d és 4d sorozat köbös szerkezetű elemeire. A táblázatban feltüntetettük az  $R_c$  ion-sugár, valamint a (II.16)-ban definiált  $\alpha$  mennyiség értékeit is. A d elektronokat tartalmazó konfigurációk esetében az átfedési integrál együtthatóját illesztettük  $R_a$  megfigyelt egyensúlyi értékéhez, az „egyszerű fém” modellben pedig az  $R_c^{(1)}$  és  $R_c^{(2)}$  paramétereket  $R_a$  és  $B$  kísérleti értékeihez történő illesztéssel határoztuk meg (lásd IV. táblázat).

Elem	$z_s$	$z_d$	$R_c^{(1)}$ (a. u.)	$\alpha$	$C$ ( $\times 10^{-1}$ kbar)	$C'$
V	1	4	2,268	0,0060	-2	55
	3	2	1,684	0,0184	73	2
	4	1	1,492	0,0246	50	-119
	„egyszerű fém” modell (5,0) mért érték		1,352	—	37	57
					43	55
Cr	1	5	2,148	0,0060	-8	67
	4	2	1,439	0,0232	74	-145
	„egyszerű fém” modell (6,0) mért érték		1,180	—	17	0
					101	141
Fe	1	7	1,941	0,0078	-1	28
	2	6	1,691	0,0124	44	3
	3	5	1,497	0,0170	26	62
	mért érték				115	48
Ni	1	9	1,771	0,0085	-2	19
	2	8	1,560	0,0124	25	17
	3	7	1,394	0,0162	9	55
	mért érték				118	49

## V/b 4d sorozat

Elem	$z_s$	$z_d$	$R_c^{(1)}$ (a. u.)	$\alpha$	$C$ ( $\times 10^{-1}$ kbar)	$C'$
Nb	1	4	2,580	0,0136	-36	39
	3	2	1,962	0,0434	66	-14
	4	1	1,752	0,0568	49	-181
	„egyszerű fém” modell (5,0) mért érték		1,675	—	20	64
					29	56
Mo	1	5	2,466	0,0177	-58	46
	4	2	1,698	0,0499	67	-225
	5	1	1,539	0,0609	12	66
	„egyszerű fém” modell (6,0) mért érték		1,566	—	-61	-2
					112	147
Rh	1	8	2,178	0,0120	-43	16
	2	7	1,922	0,0208	21	-45
	3	6	1,720	0,0297	22	50
	mért érték				—	—
Pd	1	9	2,096	0,0123	-25	6
	2	8	1,858	0,0198	14	-27
	3	7	1,669	0,0273	9	31
	mért érték				72	26



zatok elején levő fémeknél ez azt jelenti, hogy ezeket az elemeket a *kohéziós és rugalmas* állandók meghatározásánál jó közelítéssel *egyszerű fémként* kezelhetjük (ez a közelítés a hat vegyértékű króm és molibdén esetében már kevésbé jó). Hasonló eredményre jutott *Schmit* és *Lucas* [71] a fémek felületi energiájának vizsgálatánál, amennyiben azt tapasztalták, hogy a felületi energiát a kémiai vegyérték és az egyensúlyi atomi sugár már jó közelítésben meghatározza.

### III. RÉSZ

#### Nemesfémek

##### 1. A réz kohéziós tulajdonságai

Az előző részben az átmeneti fémek vizsgálatánál láttuk, hogy modellszámításunk a réz esetében — különösen a kompresszibilitás értékére — a tapasztalattól eltérő eredményeket ad. Ez nem meglepő, ha figyelembe vesszük, hogy a modellben elhanyagoltuk azokat az energiatagokat, amelyek a *törzs-törzs* tasztítás forrásai lehetnek; ez a kölcsönhatás pedig meghatározó szerepet játszik a nemesfémek rugalmas tulajdonságaiban [32], [37]. Ebben a fejezetben az elhanyagolt tagok szerepét vizsgáljuk a réz kohéziós tulajdonságainak kialakításában.

Fuchs [32] klasszikus munkája óta számos kísérlet történt a nemesfémek, köztük a réz kohéziós tulajdonságainak meghatározására. Ezek egy része [49], [50] a réz teljes energiáját, mint az atomi sugár függvényét, paraméteres alakban állítja elő, a paraméterek értékeit pedig a rendelkezésre álló kísérleti adatokhoz illeszti. A számításoknak egy másik csoportja [35], [37], [45]—[48] sávszerkezet-számítási módszerek felhasználásával határozza meg a kohéziós tulajdonságokat.

A paraméteres közelítések jellemző vonása, hogy — az egyszerű fémeknél használt *s* energiarész mellett — a *d* elektronok *tasztító* járulékot jelentenek a teljes energiában. (Pl. Born—Mayer potenciál.) Ez a leírás azonban a *d* elektronok szerepét túlságosan leegyszerűsíti, ami a modellparaméterek nemfizikai értékében is megnyilvánul. Így szükségessé válik a *d* elektronok pontosabb figyelembevétele. Erre alkalmasnak látszanak a sávszerkezet-számítási módszerek, célunknak azonban nem felelnek meg, két okból. Először is az egyelektron energiák összegezése csak egy közbülső lépés a teljes energia meghatározásában (ld. (I.35) összefüggés). Másrészt a sávszerkezet-számítási módszerekkel az elektronsávok egymáshoz viszonyított elhelyezkedését határozhatjuk meg, míg a fém kohéziójában az energianívók *abszolút* helyzete lényeges. Az I/1. fejezetben az egyszerű fémek esetében láttuk, hogy az energianívók abszolút helyzetét, valamint az elektron-elektron kölcsönhatások értékét elsősorban *szerkezetfüggetlen* mennyiségek határozzák meg [20], [21], [24]. A réz teljes energiájának számításánál is ezt a szerkezetfüggetlen közelítést fogjuk alkalmazni.

A számítást az I/2. fejezet alapján végeztük el. A fémekben (I.26)-nak megfelelően kétfajta elektron-állapotot tételeztünk fel. A *d* elektronokat lokalizált, egymásra ortogonális *atomijellegű* pályákkal írtuk le, míg az *s* elektronokat szabad OPW állapotokkal közelítettük. Az elektron-elektron és elektron-ion kölcsönhatásokat analitikus közelítések felhasználásával határoztuk meg (ld. Függelék). Számításunk



két paraméter tartalmaz: egyik az (I.31)-ben szereplő *Ashcroft sugár*, a másik az ún. *„exchange charge” taszítás* együtthatója [72]. Számításunkban a réz elektronkonfigurációját  $3d^{10}4s$ -nek tételeztük fel és az  $s$  energiarész számításánál a potenciál perturbációs sorában elhanyagoltuk a másod- és magasabb rendű tagokat (mivel  $z_s=1$ , ez jó közelítés).

A számítás fontosabb eredményei a következők: Az energiát (I.37) alapján két részre bonthatjuk (az előző számítások eredményeivel történő egyszerűbb összehasonlítás érdekében  $s$  energia alatt most az  $E^s + \frac{1}{2} E_{ii}$  összeget értjük). Az (I.38)  $s$

energia térfogatfüggésére Fuchs Wigner—Seitz számításához [32] hasonló eredményeket kaptunk, az (I.29)  $d$  energijárulékra azonban modellünk — mint látni fogjuk — nem egy egyszerű taszító tagot ad. A  $d$  energiának mind az értéke, mind a nyomásjáruléka enyhén negatív, azaz az egyensúlyi atomi sugár környezetében *vonzó* kölcsönhatás jellegű, és csak kisebb atomi sugarak esetén válik taszítóvá. A fenti tulajdonságok mellett a  $d$  energia viszonylag nagy járulékot ad a térfogati modulushoz, azaz az egyensúlyi atomi sugár környezetében az energiagörbe nagy görbületet mutat. A  $d$  energiagörbének ez az alakja teszi lehetővé, hogy a paraméteres  $s$  energiagörbe megegyezzen az „ab initio” számítások eredményeivel, és ugyanakkor a számolt kohéziós paraméterek a tapasztalattal összhangban legyenek. Ha a  $d$  energiát egy egyszerű taszító taggal reprezentálnánk a teljes energiában, az egyensúlyi kohéziós adatokból meghatározott modellparaméterek *szükségszerűen* az  $s$  energiagörbe erős összehúzódasához, sőt imaginárius Ashcroft-sugárhoz vezetnének [49], [50].

Modellszámításunkban a paramétereket a rácsállandó és a térfogati modulus egyensúlyi értékeihez illesztettük. Ezeknek a paramétereknek a felhasználásával nemcsak a kohéziós energiára és az állapotegyenletre kaptunk megfelelő eredményeket, hanem az Ashcroft-sugár értéke és az  $s$  sáv helyzete is jól egyezett az elméletileg elvárt eredményekkel.

A fejezet következő részében az átmeneti fémek tárgyalásánál használt közelítések jogosságát vizsgáltuk, majd az átlagos vagy „renormált” energianívók helyzetét hasonlítottuk össze más munkák eredményeivel. Ezután rátértünk a számítások részletes ismertetésére.

### 1/a. Alapfeltevések

A teljes energiát Hartree—Fock közelítésben, az I. rész energiakifejezései alapján határoztuk meg. Számításunkban a következő fontosabb közelítéseket alkalmaztuk:

- i) A réz kötési elektronjai kétfajta elektronállapotban lehetnek: atomi jellegű  $d$  pályákból felépített Wannier-állapotokban és közel-szabad  $s$  elektronállapotokban, melyeket OPW-k segítségével írtunk le. Számításunkban nem vettük figyelembe, hogy a kétféle állapot nem ortონális egymásra, azaz modellünkben az OPW-k csak a törzselektronok pályáira ortogonálisak.

Így (I.26)-nak megfelelően a kötési elektronok sűrűségmátrixa két részre bontható:

$$\varrho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \varrho^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \varrho_W^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (\text{III.1})$$

ahol  $\varrho^s$  az elektronok sűrűségmátrixa,  $\varrho_W^d$  pedig az ionok körül centrált Wannier-állapotokból felépített  $d$  elektronsűrűséget írja le.



- ii) Feltételezzük továbbá, hogy a Wannier-állapotokat atomi jellegű függvények ortogonalizált kombinációiból építhetjük fel [51]. Így a  $d$  sűrűségmátrix két részre bontható:

$$\varrho_W^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \varrho_0^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \varrho_{ov}^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (\text{III.2})$$

ahol az első tag a  $\psi_\lambda$  atomi jellegű  $d$  pályákból felépített sűrűségek összege,

$$\varrho_0^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_L \varrho_{0L}^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (\text{III.3})$$

ahol

$$\varrho_{0L}^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 2 \sum_{\lambda=-2}^2 \psi_\lambda^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}_L; \alpha) \psi_\lambda(\mathbf{r}'-\mathbf{R}_L; \alpha)$$

a második tag pedig az ortogonalizálásból származó „átfedési sűrűség”. A (III.3) kifejezésben  $\lambda$  a mágneses kvantumszám,  $\alpha$  pedig a  $\psi_\lambda$  hullámfüggvény paramétereit jelenti (effektív töltés stb.), melyek a fémekben és az atomokban különböző értékeket vehetnek fel.

A fenti közelítésben  $\varrho_{ov}^d$  a következő tulajdonságokkal rendelkezik:

- a)  $\varrho_{ov}^d$  legalacsonyabb rendben arányos a két szomszédos rácspontban centrált  $\psi_\lambda$  hullámfüggvény közti  $S$  átfedési integrállal,
- b) A  $\varrho_{ov}^d$  átfedési sűrűség egyrészt az ionok közötti egyenes felezőpontjában jól lokalizált töltéscsökkenést (az ún. „exchange charge”), másrészt az ionok környezetében az ennek megfelelő töltésnövekedést írja le.

A fentiek alapján a  $\varrho_{ov}^d$ -ból származó energiatagok nagyságrendje  $S^2$  lesz, ha az átfedési sűrűségben  $S$ -ben csak a legalacsonyabb rendű tagokat vesszük figyelembe. Ezt használja fel az „exchange charge” közelítés [72], [73] — az „exchange charge” gyakorlatilag pontszerű lokalizáltságával együtt — amelyben a  $\varrho_{ov}^d$ -ból származó összes energiatagot *formálisan arányosnak* tekintik  $S^2$ -el. Számításunkban mi is ezt a közelítést fogjuk alkalmazni.

Mivel az „exchange charge” az ionok között erősen lokalizálódik, hatását nem tudjuk figyelembe venni egy *csak gömbszimmetrikus* töltéseloszlásokat feltételező modell segítségével. A töltéseloszlás fennmaradó részét azonban ( $\varrho^s$ ,  $\varrho_0^d$ ) jól közelíthetjük gömbszimmetrikus eloszlások felhasználásával. Így ezekre a sűrűségekre feltételeztük, hogy

- iii/a a  $\varrho^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  s elektron sűrűségmátrixot *szabad* OPW-kból építettük fel, azaz elhanyagoltuk az OPW-k szóródását az ionokon,
- iii/b a (III.3)-ban definiált atomi jellegű  $d$  sűrűségmátrix  $\varrho_0^d(\mathbf{r})$  diagonális részét gömbszimmetrikus  $\tilde{\varrho}_L^d$  sűrűségek összegeként állítottuk elő:

$$\varrho_0^d(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \sum_L \tilde{\varrho}_L^d(r) \quad (\text{III.4})$$

ahol

$$\tilde{\varrho}_L^d = \tilde{\varrho}^d(|\mathbf{r}-\mathbf{R}_L|) = 0, \quad \text{ha} \quad |\mathbf{r}-\mathbf{R}_L| > R_{WS}$$

(itt  $R_{WS}$  a Wigner—Seitz-sugár).

Mielőtt a részletes tárgyaláshoz hozzákezdénénk, tisztáznunk kell néhány kérdést a fenti közelítésekkel kapcsolatban.



- a) Modellünkben az  $s$  elektronokat egyetlen OPW-vel írjuk le, amely nem ortogonális a  $d$  állapotokra és amelynek a rácspotenciálon történő szóródását elhanyagoljuk. Ezek az *egyelektron probléma* szempontjából nyilvánvalóan durva közelítések, a teljes energia azonban kevésbé érzékeny ezekre a hatásokra. (Az I.1.1 fejezetben láttuk, hogy az egyvegyértékű alkálifémeknél a másodrendű tag elhanyagolása jó közelítés.) Ennek formális oka az, hogy az összegezésnél az egyelektron nívók eltolódásai kiátlagolódnak. Más szavakkal, a teljes energiában a rácspotenciál először másodrendben ad járulékot, míg az egyelektron spektrumban a „gap”-eket elsőrendű tagok határozzák meg. Az egyszerű fémek kohéziójának leírására használt szerkezetfüggetlen modell (ld. I/d. fejezet) eredményessége is ennek a következménye.
- b) Egy másik tisztázandó kérdés modellünkben az atomi jellegű függvények használata a  $d$  állapotok leírására, ugyanis a Wannier-állapotokat felépítő rezonancia-hullámfüggvények nem csökkennek exponenciálisan a távolsággal [74]. Pettifor [75] azonban megmutatta, hogy a rezonancia-hullámfüggvény oszcilláló „farkát” exponenciálisan levághatjuk és az OPW-járulékba transzformálhatjuk anélkül, hogy az egyelektron spektrum megváltozna. Így a rezonanciaállapot megmaradó része valóban megfelel egy „effektív” atomi pályának. Számításunkban ezt az „effektív” hullámfüggvényt egy módosított atomi  $d$  pályával közelítettük, melynek paramétereit az energiaminimum feltételből határoztuk meg. (A lokalizált, atomi jellegű  $d$  állapotok definiálására további példákat szolgáltat a renormált atommodell [39], valamint Lipari és Deegan módszere [76]).
- c) Végül felhívjuk a figyelmet arra, hogy az „exchange charge” közelítés általunk használt formája különbözik az eredeti definíciótól. Ez a különbség annak a következménye, hogy modellünkben az energia *Coulomb* részét — a gömbszimmetrikus sűrűség közelítés keretein belül (ld. iii/b) — pontosan határoztuk meg, míg az eredeti módszer ezeket a tagokat is  $S^2$ -tel arányosnak tekinti. Számításunkban az  $S^2$ -es energiatag együtthatóját szabad paraméternek tekintettük. Ezt a gyakran alkalmazott közelítést [72] az a tény teszi indokoltá, hogy az LCAO közelítésben meghatározott együttható nagy abszolút értékű tagok különbségeként áll elő [51], ami nagyon bizonytalanná tenné az eredményt.

### 1/b. A közel-szabad $s$ elektronok energiája

A kötési elektronok sűrűségét (III.1) alakban feltételezve, a teljes energia (I.37)-nek megfelelően két részre osztható. Az  $s$  elektronrészre (I.28) alapján az

$$E^s = \left( E_k^s + E_{ie}^s + \frac{1}{2} E_{ee}^s \right) + E_{ee}^{sd0} \quad (\text{III.5})$$

kifejezést kapjuk, ahol a „0” index azt jelenti, hogy a mennyiség definíciójában a  $d$  sűrűségnek csak a  $\varrho_0^d$  része szerepel, azaz

$$E_{ee}^{sd0} = E_0^{sd} = 2 \int_{(WS)} \frac{\varrho_0^d(\mathbf{r}) \varrho^s(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' - \frac{1}{N} \int \frac{\varrho_0^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varrho^s(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad (\text{III.6})$$



ahol (WS) arra utal, hogy az integrálást a Wigner—Seitz gömbön belül kell elvégezni. Az I/2. fejezetben mondottak alapján (III.5)-ben a zárójeles kifejezés a pozitív ionok terébe ágyazott közel-szabad elektronrendszer alapállapotú energiája, ezért alkalmazhatjuk rá az egyszerű fémek esetében használt közelítéseket, azaz (I.38) és (I.31) alapján az  $s$  energia (a másodrendű tag elhanyagolásával)

$$E^s = \frac{2,21}{R_a^2} \lambda_0 - \frac{0,916}{R_a} + E_{\text{corr}} + E_1^s \quad (\text{III.7})$$

ahol

$$E_1^s = \varepsilon_b^s + \frac{3}{R_a}$$

$$\varepsilon_b^s = z\lambda_0 \left( -\frac{3}{R_a} + \frac{3r_i^2}{R_a^3} \right) + E_0^{sd}. \quad (\text{III.8})$$

Az „ortogonalitási lyuk” korrekciót figyelembe vevő  $\lambda_0$ -t az (I.19) közelítés alapján számítottuk ki.

A (III.8) kifejezést (I.31)-nek megfelelően átírhatjuk, és így ((I.32)-nek megfelelően) a sáv aljára a következő alakot kapjuk:

$$\varepsilon_b^s = \lambda_0 z_{\text{eff}}^s(R_a) \left( -\frac{3}{R_a} + \frac{3r_i^2}{R_a^3} \right). \quad (\text{III.9})$$

Az  $s$  és  $d$  elektronsűrűségeknek a mag körüli elhelyezkedését figyelembe véve azt várjuk, hogy  $E_0^{sd}$  a  $z=11$ -es iontöltés nagyrésztet leárnyékolja, így  $z_{\text{eff}}^s$  értéke közel egységnyi lesz.

A fentiek alapján tehát egy paraméter ( $r_i^2$ ) segítségével előállítottuk a nemesfémek teljes energiájának  $s$  elektronrészét. Az energia kiszámítási módja abban tér el az egyszerű fémek esetétől, hogy a  $d$  elektronokat külön kell választanunk a törzselektronoktól, mivel az atomi térfogat változásával a  $d$  sűrűség maga is változik.

### I/c. A $d$ energia

A  $d$  elektronsűrűség (III.2) alatti felbontását (I.29)-be helyettesítve az

$$E^d = E_k^{d0} + E_{ie}^{d0} + \frac{1}{2} E_{ee}^{d0} + E_s^d \quad (\text{III.10})$$

kifejezéshez jutunk.  $E_s^d$  tartalmazza a nemesfémek zárt  $d$  héjai közötti kölcsönhatási energiát.  $E_k^{d0}$ ,  $E_{ie}^{d0}$  és  $E_{ee}^{d0}$  definíciói pedig (I.33)-nak megfelelően a (Coulomb-tagokra a semleges-gömb közelítést alkalmazva):

$$E_k^{d0} = \frac{1}{N} \int -\nabla_{\mathbf{r}}^2 \varrho_0^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}')_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

$$E_{ie}^{d0} = 2 \int_{(WS)} \frac{\varrho_0^d(\mathbf{r}) \varrho^c(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' - \frac{1}{N} \int \frac{\varrho_0^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varrho^c(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'$$

$$E_{ee}^{d0} = 2 \int_{(WS)} \frac{\varrho_0^d(\mathbf{r}) \varrho_0^d(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' - \frac{1}{N} \int \frac{\varrho_0^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varrho_0^d(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad (\text{III.11})$$

$E_S^d$  a  $\varrho_{0v}^d$ -ból származó energiatagokon kívül az atomok közötti d—d kicserélődési energiát is tartalmazza, amely szintén  $S^2$  nagyságrendű.

A fenti tagok kiszámításához  $\varrho_0^d(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  ismerete szükséges. A (III.3.) kifejezés szerint  $\varrho_0^d$ -t atomi jellegű d hullámfüggvények határozzák meg:

$$\psi_\lambda(\mathbf{r}; \alpha) = R_2(\mathbf{r}; \alpha_i, A_i) Y_{2\lambda}(\theta, \varphi) \quad \lambda = -2, \dots, 2 \quad (\text{III.12})$$

ahol a radiális részt két Slater-típusú pályából (STO) építettük fel (ld. Függelék):

$$R_2(r; \alpha_i, A_i) = A_1 \left( \frac{(2\alpha_1)^7}{6!} \right)^{1/2} r^2 e^{-\alpha_1 r} + A_2 \left( \frac{(2\alpha_2)^7}{6!} \right)^{1/2} r^2 e^{-\alpha_2 r}. \quad (\text{III.13})$$

Ez a közelítés az átmeneti fémek ionjaira és atomjaira elvégzett energiaszámításokban megfelelő eredményeket ad, így remélhető, hogy a függvényalak megőrzése és a paramétereknek az energiaminimum-feltételből történő meghatározása a fémek esetében is jó közelítés lesz.

A fentiek alapján nyilvánvaló, hogy  $E_k^{d0}$ , valamint  $E_{ie}^{d0}$  és  $E_{ee}^{d0}$  kicserélődési részei csak *implicit módon*, a d hullámfüggvény paramétereinek változásán keresztül függenek az  $R_a$  atomi sugártól. Ezeknek a tagoknak  $\varrho_{0v}^d$ -ból származó *explicit*  $R_a$ -függését  $E_S^d$  tartalmazza. Az „exchange charge” közelítés felhasználásával

$$E_S^d = C \frac{[S(R_{nn})]^2}{R_{nn}} \quad (\text{III.14})$$

ahol  $C$  állandó, amelyet a továbbiakban szabad paraméternek tekintünk, az  $S$  „effektív” átfedési integrál definíciója pedig

$$S(R_{nn}) = \int_0^\infty R_2(r) R_2(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_{nn}|) r^2 dr. \quad (\text{III.15})$$

Itt  $\mathbf{R}_{nn}$  a legközelebbi szomszéd ion koordinátája. Számításunkban az egyszerűség kedvéért egyetlen „effektív” átfedési integrált használtunk a (III.12) szögfüggése következtében fellépő három ( $\sigma$ ,  $\pi$ ,  $\delta$ ) átfedési paraméter helyett.

Mint már említettük, a teljes energiában fellépő Coulomb-tagokra — az „exchange charge” közelítés eredeti formájától eltérően — nem alkalmaztuk az  $S^2$ -es közelítést, hanem a semleges-gömb modell keretein belül pontosan határoztuk meg őket.

Ehhez szükségünk volt a d elektronok sűrűségének ismeretére a Wigner—Seitz gömbön belül, melyet a következő feltételek alapján határoztunk meg:

i) A Wigner—Seitz gömbben levő teljes töltés állandó, azaz

$$\int_{(WS)} \tilde{\varrho}^d(r) r^2 dr = z - 1 = z_d \quad (\text{III.16})$$

ahol  $\tilde{\varrho}^d(r)$  a (III.4)-ben definiált gömbszimmetrikus sűrűség,  $z_d$  pedig a d elektronok száma.

ii) A sűrűség „sima” a Wigner—Seitz gömb határán, azaz

$$\left( \frac{d\tilde{\varrho}^d}{dr} \right)_{r=R_a} = 0. \quad (\text{III.17})$$



A  $\tilde{\varrho}^d$  gömbszimmetrikus  $d$  sűrűség előállításánál Stern módszerét [30] alkalmaztuk, amely a legközelebbi szomszédok sűrűségjárulékait polinóm alakban veszi figyelembe

$$\tilde{\varrho}^d(r) = \begin{cases} \varrho_0^d(r) + \sum_{k=0}^2 C_{2k}(R_a) r^{2k} & r \leq R_a \\ 0 & r > R_a \end{cases} \quad (\text{III.18})$$

ahol  $\varrho_0^d$  a (III.3)-ban definiált atomi jellegű  $d$  sűrűség radiális része. A  $C$  együtthatók közül kettőt (III.16) és (III.17) alapján határoztunk meg, míg a harmadikat a következő feltételek egyikének felhasználásával rögzítettük:

a) A  $d$  sűrűség eltűnik az origóban, azaz  $C_0 = 0$

b) Az origóban a  $d$  sűrűség a szomszédos atomok sűrűségeinek összege.

Az első feltevés alapját a Wigner—Seitz módszer eredményei képezik. A második feltevés az atomi sűrűségek egyszerű szuperpozícióját jelenti, ami a sáv szerkezet-számításokban gyakran alkalmazott közelítés. Számításaink — mint látni fogjuk — azt mutatják, hogy — a (III.16) és (III.17) feltételeket kielégítő  $d$  sűrűség mellett — a végső eredmények nem érzékenyek  $\tilde{\varrho}^d$  további részleteire.

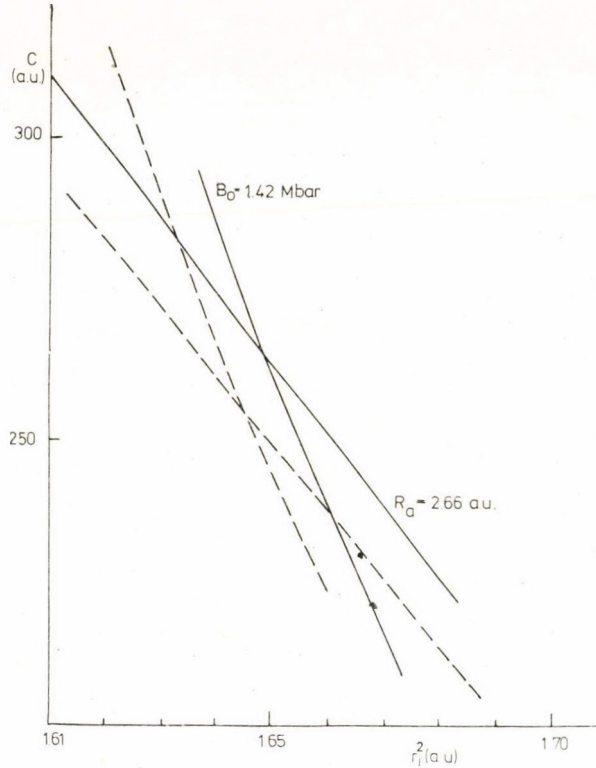
A Coulomb-tagok meghatározásánál a  $d$  sűrűség (III.18) kifejezésén kívül szükségünk van az  $s$  elektronok sűrűségére is. Ezt egy  $\mathbf{k}=0$  hullámvektorú OPW négyzeteként állítottuk elő. Mind az OPW, mind  $E_{ie}^{d0}$  meghatározásánál a törzselektronok leírására közelítő analitikus hullámfüggvényeket használtunk (ld. Függelék).

### 1/d. Numerikus eredmények

A fentiek alapján tehát (III.7) (III.10) valamint az  $E_M = -1,8/R_a$  Madelung-energia segítségével előállítottuk a réz teljes energiáját, mint az atomi sugár függvényét. Hátra van még a  $d$  hullámfüggvény  $\alpha_i$ ,  $A_i$  variációs paramétereinek, valamint az  $r_i$  és  $C$  állandóknak a rögzítése. Ez a következő módon történt: a  $d$  hullámfüggvény paramétereinek atomi értékeit használva az egyensúlyi kohéziós adatokból meghatároztuk  $r_i$  és  $C$  értékét, majd ezek felhasználásával meghatároztuk a  $d$  hullámfüggvény új  $\alpha_i$ ,  $A_i$  paramétereit stb. Az illesztési eljárás során már az első lépés után kielégítő pontossággal megkaptuk a paraméterek értékeit.

Megjegyezzük, hogy a  $d$  hullámfüggvény három szabad paramétere közül csak  $A_2$ -t tekintettük variációs paraméternek, az  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  árnyékolási konstansokra az atomi értékeket használtuk (Függelék 2. fejezet). A  $d$  hullámfüggvény „mozgékonyságának” erre a korlátozására azért volt szükség, mivel a hullámfüggvény — csupán két STO-t tartalmazó — közelítő alakja következtében az energia meghatározására legmegfelelőbb paraméterek nem a legjobbak az átfedési integrál kiszámításánál. Ezért az árnyékolási konstansok  $\alpha_1 = 5,06$  a. u. és  $\alpha_2 = 1,8$  a. u. értékeit a Függelék 2. fejezetében úgy határoztuk meg, hogy hullámfüggvényünk az átfedés szempontjából leglényegesebb tartományban jól közelítse a Hartree—Fock függvényt. Az árnyékolási konstansok fent rögzített értékei mellett a teljes energia az atomban az  $A_2^{at} = 0,4494$ , míg a fémbe az  $A_2 = 0,4540$  paraméterértéknél minimális. Az effektív  $d$  pályák tehát — a várakozásnak megfelelően [77] — az atomból a fémbe történő átmenetnél *kifelé* mozognak. A viszonylag kis változás annak a következménye, hogy a  $d$  pályák további kiterjedését az  $S^2$ -es energiatag növekedése megakadályozza.

A 22. ábra az  $r_i$  és  $C$  paraméterek meghatározását mutatja az egyensúlyi kísérleti adatok felhasználásával ( $R_a=2,66$  a. u. és  $B=1,42$  Mbar [78]). Az illesztésnél  $B$  értékét (II.13) alapján határoztuk meg, azaz elhanyagoltuk az  $A_2$  variációs paraméter  $R_a$ -függését. Az ebből eredő térfogati modulusjárulék azonban kisebb, mint 2%, ami számításunkban elhanyagolható. A 22. ábrán az egyensúlyi adatoknak megfelelő két görbe metszéspontja alapján az  $r_i=1,2852$  a. u. és  $C=261,7$  a. u. értékeket kaptuk. Az  $r_i$  Ashcroft-sugár és az (I.20)-ban definiált  $R_C$  OPW-sugár (réz esetén  $R_C=1,2695$ ) közti kitérés egyezését mutatja, hogy az  $r_i$  paramétert — az egyszerű fémeknél megismert módon — sikerült értelmeznünk a réz esetében is.



22. ábra. A modell-paraméterek meghatározása a rács egyensúlyi adataiból. Az  $R_a=2,66$  a. u. és  $B_0=1,42$  Mbar [78] értékekhez tartozó görbék mellett feltüntetett másik két görbe (szaggatott vonal) illusztrálja, hogy az egyensúlyi adatokban bekövetkező kis változások milyen hatással vannak az  $r_i^2$  és  $C$  paraméterekre.

Foglalkozunk ezután az  $S^2$ -es energiatagra kapott eredményeink értékelésével. Vizsgáljuk meg először, milyen hibához vezet számításunkban a közelítő  $d$  hullámfüggvények, valamint a  $d$  pályák szögfüggését elhanyagoló 'effektív' átfedési integrál használata. Ennek értelmében  $S^2$ -et egy exponenciális függvényhez illesztettük az egyensúlyi legközelebbi szomszéd távolság környezetében,

$$S^2(R_{nn}) \sim \exp(-R_{nn}/\varrho) \quad (\text{III.19})$$

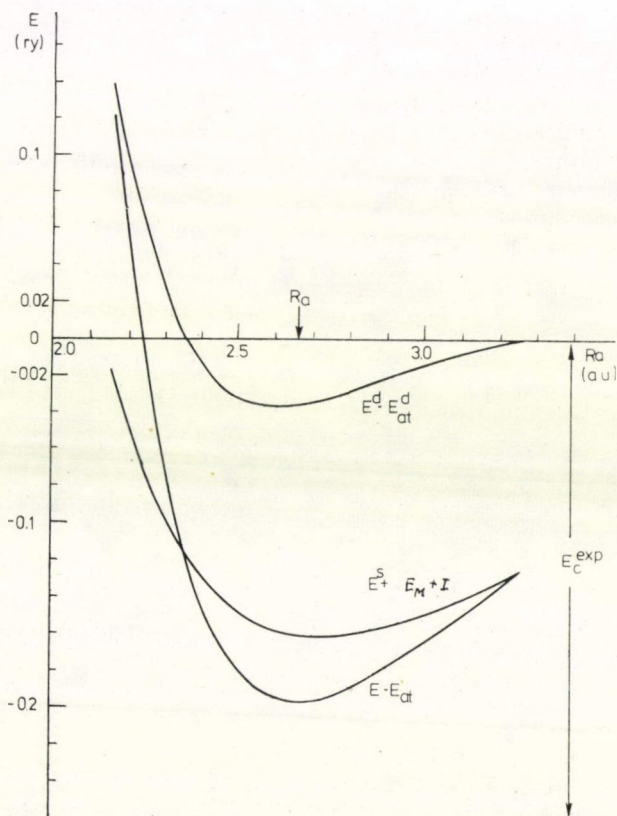


és így lehetővé vált eredményeink összehasonlítása egy pontos atomi Hartree—Fock számítással [72]. A modellünkben alkalmazott közelítések jogosságát igazolja az a tény, hogy az általunk kapott  $\varrho=0,2805 \text{ \AA}$  érték jól egyezik Hafemeister [72]  $\varrho=0,2777 \text{ \AA}$  eredményével.

A  $C$  paraméterre kapott eredményünk értékelése érdekében  $E_S^d$ -t az  $R_{nn}^0$  egyensúlyi legközelebbi szomszéd távolság körül egy Born—Mayer függvénnyel közelítettük

$$E_S^d = C \frac{[S(R_{nn})]^2}{R_{nn}} \approx D e^{-(R_{nn}-R_{nn}^0)/\varrho_1}. \quad (\text{III.20})$$

A  $\varrho_1$ -re kapott  $0,2525 \text{ \AA}$  érték — a (III.19)-ben szereplő  $\varrho$ -hoz hasonlóan — ismét jól egyezik az atomi számítás  $\varrho_1^{\text{at}}=0,25 \text{ \AA}$  eredményével, ami újból alátámasztja a két STO hullámfüggvény és az „effektív” átfedési integrál használatának jogosságát. Mivel a jelen esetben  $E_S^d$  egy elemi cellára vonatkozik, a szokásos Born—Mayer pár köcsönhatás-amplitúdójával  $D/6$  értékét hasonlíthatjuk össze. A kapott  $D/6=$



23. ábra. A réz teljes energiája  $R_a$  függvényében. Az ábrán feltüntettük az s és d energiajárulékokat is, amelyeket (III.5), ill. (III.10) definiál.  $E_c^{\text{exp}}=0,257 \text{ ry}$  a kohéziós energia kísérleti értéke,  $I=0,5677 \text{ ry}$  az első ionizációs energia,  $E_{\text{at}}^d$  pedig  $E^d$  értéke  $R_a=\infty$ -nél.

$=0,3376$  eV érték az előző számítások eredményeinek két-háromszorosa (pl. [49]). Ez nem meglepő eredmény, mivel modellünkben — a szokásostól eltérően —  $E_s^d$  definíciójában a vonzó Coulomb-tagok nem szerepelnek, amelyek Dick és Overhauser munkája [73] szerint kb. felére csökkentik  $E_s^d$  együttthatóját.

Számításunk legfontosabb eredményeit a 23. ábra és a VI. táblázat mutatja. A 23. ábrán az  $E^s + E_M + I$  és  $E^d - E_{at}^d$  energiajárulékok, valamint az  $E - E_{at}$  teljes energia  $R_a$ -függése látható. Értékeljük először az s energiarészre kapott eredményeinket. Az ábrán látható  $E^s + E_M + I$  görbe hasonló Fuchs Wigner—Seitz számításának eredményéhez. A görbe alakjából megfigyelhetjük, hogy a kohéziós energia és különösen az atomi sugár értékére csak az s elektronrész felhasználásával is közelítőleg helyes eredményeket kapnánk. Ennek oka a következő: a d héj töltődésével az OPW-sugár értéke monoton csökken a káliumtól a rézig, ahogy a 3s héj egyre beljebb húzódik a maghoz. Ez látható a 24. ábrán a 3d átmeneti fémekre. Feltételezve, hogy  $r_i$  az OPW-sugárhoz hasonló viselkedést mutat — ami az ábrán a kálium és réz esetében feltüntetett értékeknél teljesül — az s sáv aljának, és ezáltal  $E^s$ -nek a minimuma is egyre kisebb Wigner—Seitz sugarak felé tolódik el. A kálium és a réz esetében — ahol a d sávenaergia eltűnik — ez a meghatározó tényező a fém atomi sugarának a kialakításában. Az s elektronok meghatározó szerepét ebben az esetben az ábrán szintén feltüntetett  $R_c/R_a$  értékek is mutatják, mivel ez az arány kálium és réz esetében közel egyenlő, és  $R_c$  (ld. (I.20)) értéke nincs kapcsolatban a d elektronokkal. A nyílt d héjjal rendelkező átmeneti fémek esetében ugyanakkor — a második részben mondottaknak megfelelően — a d sávenaergia-járulék jut lényeges szerephez, az atomi sugár jellegzetes rendszámfüggésének kialakításában.

Míg  $E^s$  a réz kohéziós energiájának és atomi sugarának a kialakításában meghatározó szerepet játszik, térfogati modulusjáruléka jóval kisebb a megfigyelt ér-

## VI. TÁBLÁZAT

A réz teljes energiájának ( $E$ ), nyomásának ( $P$ ) és térfogati modulusának ( $B$ ) különböző járulékai, valamint a térfogati modulus nyomás szerinti deriváltja  $\left(\frac{dB}{dP}\right)$  az egyensúlyi atomi sugárnál (A további jelöléseket ld. a szövegben).

	$E(\text{ry})$	$P(\text{Mbar})$	$B(\text{Mbar})$	$\frac{dB}{dP}$
$\varepsilon_b^s$	-1,101	-0,513	0,051	
$E_s^d$	0,149	0,934	3,052	
$E^s + E_M + I$	-0,160	0,050	0,757	
$E^d - E_{at}^d$	-0,035	-0,050	0,664	
$E - E_{at}$	-0,196	0	1,420	5,64
kísérlet	-0,257	0	1,420	5,59 <sup>a</sup>
				7,7 <sup>b</sup>
				4,1 <sup>c</sup>
				5,3 <sup>d</sup>

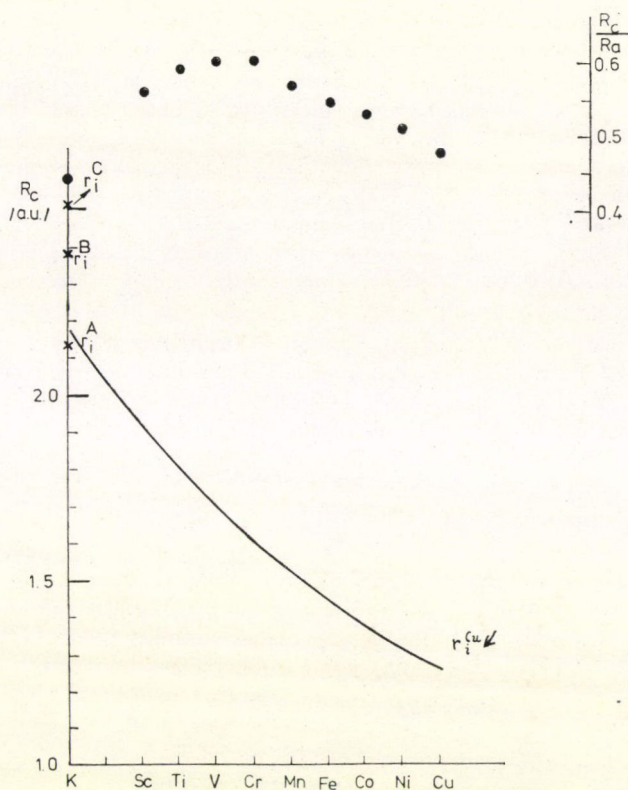
<sup>a</sup>Daniels W. B. and Smith C. S., Phys. Rev. 111, 713, 1958. (szobahőmérséklet).

<sup>b</sup>Salama K. and Alers G. A., Phys. Rev. 161, 673, 1967. (4 K)

<sup>c</sup>Rice M. H., McQueen R. G. and Walsh J. M. in Solid State Physics (Ed. by F. Seitz and D. Turnbull), Vol. 6, p. 1, (szobahőmérséklet).

<sup>d</sup>Bridgman P. W., Proc. Am. Acad. Arts. Sci. 77, 187, 1949. (szobahőmérséklet).





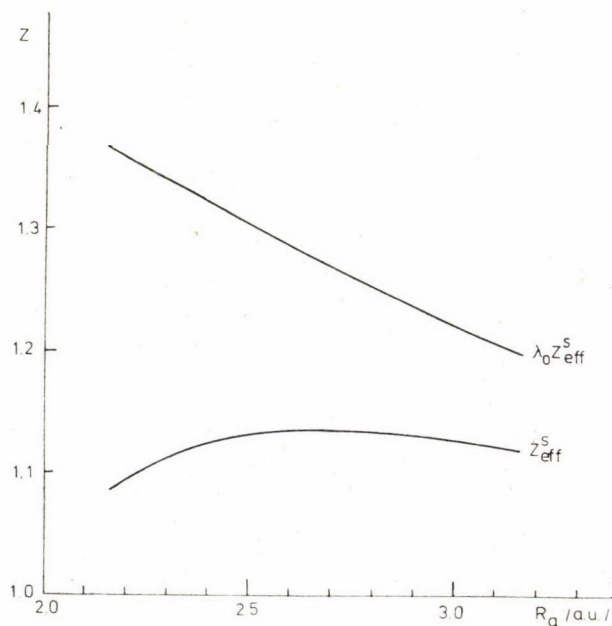
24. ábra. Az OPW-sugár rendszámfüggése a 3d sorozatra. A (I.20)-ban definiált  $R_c$ -n kívül  $r_i$  rendelkezésre álló értékeit is feltüntettük. A kálium esetében  $r_i^C$  a kristálytani ionsugár,  $r_i^A$  Ashcroft [57],  $r_i^B$  pedig Brovman et al. [24] eredménye. A réz esetén  $r_i^{Cu} = 1,2852$  a. u. Az ábrán az  $R_c/R_a$  értékeket is ábrázoltuk.

téknél. Szükséges tehát, hogy a d elektronok jelentős mértékben hozzájáruljanak a térfogati modulusához. Az előző munkákban [32], [49], [50] a d elektronokat egy *taszító* energiajárulék alakjában vették figyelembe, ami azonban — az egyensúlyi atomi sugár értékének megőrzése mellett — az  $E^s$  görbe erős eltorzulásához vezetett. Ezt mutatja az  $r_i^2$  paraméterre kapott negatív érték is [49], [50]. Ezzel ellentétben modellünkben a d elektronok a rács egyensúlyi állapotában *vonzó* energiajárulékot adnak, ami annak a következménye, hogy számításunkban a Coulomb-tagokra nem alkalmaztuk az  $S^2$ -es közelítést, hanem — a semleges gömbmodell keretein belül — pontosan határoztuk meg őket. Így modellünkben  $E^d$ -nek mind az értéke, mind a nyomásjáruléka negatív az egyensúlyi atomi sugár környezetében, nagy pozitív görbülete következtében ugyanakkor lényegesen megnöveli a térfogati modulus értékét (Schneiderman és Michels hasonló viselkedést tapasztalt a He—Li<sup>+</sup> rendszer esetében [79]). A teljes energia, a nyomás és a térfogati modulus különböző járulékait a VI. táblázat összegezi. (A táblázatban szereplő atomi mennyiségeket (at) az  $\alpha_i$ ,  $A_i$  variációs paraméterek atomi értékeinek felhasználásával határoztuk meg; az  $I$

ionizációs energiára az  $I=0,5677$  ry értéket használtuk). Az s elektronok kohéziós energijárulékára kapott érték ( $E^s + E_M + I = -0,160$  ry) jól egyezik Fuchs Wigner—Seitz számításának [32] eredményével. Hasonlóan jó összhangban van Fuchs eredményeivel az s sáv aljának térfogati modulusjárulékára kapott elhanyagolhatóan kicsi érték is. Megjegyezzük, hogy  $E^s + E_M + I$  fenti értéke mellett *negatív*  $E^d - E_{at}^d$  járulék szükséges ahhoz, hogy közelebb kerüljünk a kohéziós energia megfigyelt  $0,257$  ry értékéhez.

Számításunk további ellenőrzése céljából meghatároztuk a térfogati modulus nyomás szerinti deriváltjának az értékét is, amelyet szintén feltüntettünk a VI. táblázatban. Figyelembe véve a kísérleti értékekben tapasztalható nagy eltéréseket, számításunk eredménye kielégítőnek mondható.

Ezután visszatérünk a második részben használt közelítések vizsgálatára. Ebben a részben az átmeneti fémek teljes energiájában a d elektronrészt a d sávenergiával közelítettük, ami a réz esetében eltűnik. Így a 23. ábra alapján megállapíthatjuk, hogy míg az atomi sugár és a kohéziós energia számításánál az (I.35)-ben szereplő  $z_a e_g^d - \frac{1}{2} E_{ee}^d - E_{ee}^{sd}$  mennyiség atomi sugárfüggésének az elhanyagolása valóban nem vezet nagy hibához (ld. 6., ill. 10. ábrák), addig a térfogati modulus meghatározásánál (a sorozat végén) a kísérleti eredményeknél kisebb értékeket kell kapnunk (ld. 11, 18. és 19. ábrák). A második rész további lényeges közelítése volt az  $\epsilon_s^s$ -ben szereplő 'effektív töltés'  $R_a$ -függésének elhanyagolása (ld. (II.11) és (II.16)). Ezt a közelítést támasztja alá a réz esetében elvégzett számítás eredménye, melyet a 25. ábrán láthatunk (a  $z_{eff}^s$ , 'effektív töltés' a (III.8) és (III.9) kifejezések határozzák meg),

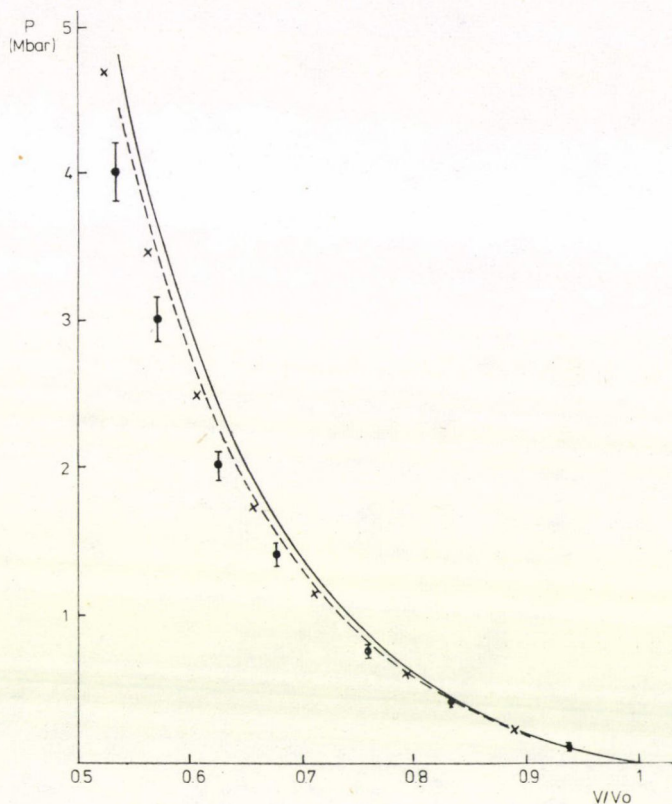


25. ábra. A (III.8) és (III.9) kifejezések által definiált  $z_{eff}^s$  'effektív töltés'  $R_a$  függvényében.



$z_{\text{eff}}^s$  értéke ugyanis az egyensúlyi atomi sugár környezetében jó közelítéssel konstansnak tekinthető ( $z_{\text{eff}}^s(R_a=2,66 \text{ a. u.})=1,135$ ).

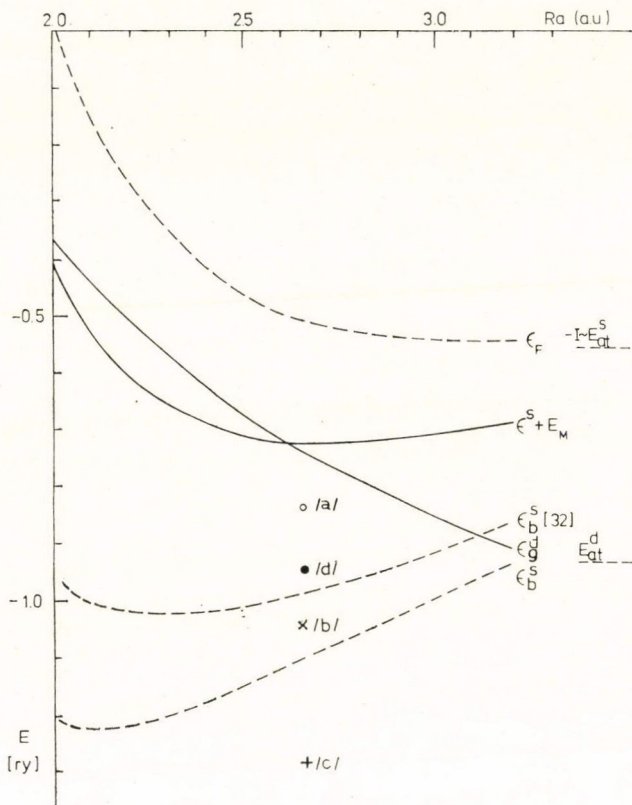
A 26. ábra a réz állapotegyenletére kapott elméleti görbét mutatja Keeler és Kennedy [69], valamint Altshuler et al. [70] kísérleti eredményeivel együtt. A két elméleti görbe a (III.18)-ban meghatározott  $d$  sűrűség kétféle közelítésének felel meg ( $c_0$  értékétől függően). Látható, hogy eredményeink nem nagyon érzékenyek a (III.16) és (III.17) általános követelményeket kielégítő  $d$  sűrűség finomabb részleteire.



26. ábra. A réz állapotegyenlete. A kísérleti görbékét (● [69] és X [70]) összehasonlítottuk számításunk eredményeivel. A számításnál a (III.18)-ban definiált  $c_0$  meghatározására két különböző közelítést használtunk (a vastag vonal esetében  $c_0=0$ ).

Végül modellünk lehetővé teszi az „átlagos” energianívók atomi sugárfüggésének a meghatározását is. Az  $s$  sáv aljának ( $\varepsilon_b^s$ ), az „átlagos”  $s$  energiának ( $E^s + E_M$ ) a Fermi energiának ( $\varepsilon_F = \lambda_0 k_F^2$ ), valamint az „átlagos”  $d$  nívónak ( $10\varepsilon_g^d = E_k^{d0} + E_{ie}^{d0} + E_{ee}^{d0} + E_0^{sd}$ ; ld. az (I.29), (I.35) és (I.36) összefüggést) atomi sugárfüggését a 27. ábra mutatja. Az ábra — az elméleti görbéken kívül — feltünteti az  $s$  sáv aljára vonatkozó különböző sávszerkezet-számítások eredményeit Fuchs Wigner—Seitz görbéjével együtt [32]. Annak ellenére, hogy modellünk az egyelektron energiák számítása szem-

pontjából durva közelítéseket tartalmaz, az „átlagos” energianívók helyzetére kapott eredményeink összhangban vannak a sávszerkezet-számítások eredményeivel (pl. az  $\epsilon_g^d - \epsilon_b^s \approx 0,35$  ry érték jól közelíti a sávyszerkezet-számítási módszerekkel meghatározott [80]  $E(\Gamma_{25'}) - E(\Gamma_1)$  különbséget). Watson et al. [39] a „renormált atom”-modell felhasználásával meghatározták  $\epsilon_g^d$  „renormálási eltolódását” (az atomi d



27. ábra. A rézegyelektron nívói  $R_a$  függvényében. Az  $E^s + E_M$  és  $\epsilon_g^d$  „átlagos” energiaszintek mellett az s sáv alját ( $\epsilon_b^s$ ) és a Fermi energiát ( $\lambda_0 k_F^2$ ) is feltüntettük. Fuchs [32]  $\epsilon_b^s$ -re kapott Wigner—Seitz eredményét szintén ábrázoltuk. Az egyensúlyi atomi sugárnál feltüntetett pontok a különböző sáv-szerkezet-számítások által nyert  $E(\Gamma_1)$  értékeket jelentik.

<sup>a</sup> Segall B., Phys. Rev. 125, 109, 1962.

<sup>b</sup> Burdick G. A., Phys. Rev. 129, 138, 1962.

<sup>c</sup> Fukuchi M., Progr. Theor. Phys. 16, 222, 1956.

<sup>d</sup> Id. [80]

nívó és  $\epsilon_g^d(R_a=2,66)$  különbsége). Ez az érték több mint kétszerese az általunk kapott 0,19 ry-nek. Ez a nagy eltérés részben a d sűrűségeloszlás különböző számítási módjának, részben  $\epsilon_g^d$  eltérő definíciójának a következménye ( $\epsilon_g^d$ -t a jelen esetben egy Wannier-állapot energiájával azonosíthatjuk).



A réz kohéziójára vonatkozó fontosabb eredményeinket a következőkben foglalhatjuk össze: A d héjak közötti kölcsönhatási energiára a szokásos Born—Mayer-típusú taszítás helyett az egyensúlyi atomi sugár környezetében enyhén vonzó járulékot kaptunk, amely csak kisebb Wigner—Seitz sugarak esetén válik taszítóvá. A kohéziós energia értékére és az állapotegyenletre a kísérletekkel összhangban levő eredményeket kaptunk. Végül modellünkben az  $r_i$  paraméter értéke jól egyezett az  $R_c$  OPW-sugár értékével, ami azt jelenti, hogy az Ashcroft-sugár egyszerű fémeknél megismert fizikai jelentését sikerült megőriznünk a nemesfémek esetében is.

## 2. Paraméteres modell a nemesfémek kohéziós és rugalmas tulajdonságainak meghatározására

A nemesfémek teljes energiáját gyakran paraméteres kifejezések segítségével határozzák meg, amelyekben az energia két részből áll: közel-szabad elektron modellben meghatározott s energia és párerők összegeként előállított *taszító* d energia [49], [50]. Bár a kohéziós és rugalmas jellemzők értékei többé-kevésbé jól reprodukálhatók ezen a módon, a modellparaméterek nemfizikai értékei (pl. imaginárius ionsugár), és ezáltal az s energiárész gyökeres eltérése az „ab initio” számítások eredményeitől [32] azt mutatja, hogy a d energiájárulék természete alapvetően különbözik az egyszerű taszítástól. Ezt támasztják alá az előző fejezet eredményei is, ahol a réz esetében meghatározott d energiának mind az értéke, mind a nyomásjáruléka enyhén negatív az egyensúlyi atomi sugár közelében és csak kisebb rácsállandóknál válik taszítóvá.

Ebben a fejezetben a nemesfémek teljes energiájában a d elektronjárulék leírására egy új analitikus kifejezést javasolunk, amely rendelkezik a fent említett tulajdonságokkal. A teljes energia meghatározásán kívül kiszámítjuk a rugalmas állandók értékét is, és ennek kapcsán taglalni fogjuk, hogy mennyire jogos a párerőfel-tételezés a nemesfémek d energiárészének leírására.

A teljes elektronenergiát (I.27)-nek megfelelően ismét egy s és egy d energiárész összegeként állítottuk elő, ahol az s energiát (I.38) alapján határoztuk meg, a d energiát pedig a következő alakban állítottuk elő:

$$E^d = -aw + bw^2; \quad w = \frac{S(R_{nn})}{R_{nn}} \quad (\text{III.21})$$

ahol  $R_{nn}$  a legközelebbi szomszéd távolság, az „effektív” átfedési integrált pedig (III.15) definiálja. A (III.21) d energia rendelkezik az előző fejezetben a réz teljes energiájának d részére meghatározott tulajdonságokkal. Mivel — (II.19)-nek megfelelően — a TB modellben az átfedési integrál lényegében arányos  $S/R_{nn}$ -el,  $W$  közelítőleg úgy változik a rácsállandóval, mint a d sáv szélessége.

Az s energiát a II/2. fejezetben leírt módon határoztuk meg,  $\lambda_0$ -ben fellépő  $R_c^{(1)}$  paramétert (I.20) alapján számítottuk ki (az előző fejezet rézre vonatkozó számításai azt mutatták, hogy ez jó közelítés).  $E_s^2$  meghatározásánál (II.17) alatt megadott potenciált használtuk. Megjegyezzük, hogy ebben az esetben a  $v = R_c^{(2)}/R_c^{(1)}$  arányt 0,86-nak választottuk [4],  $R_c^{(2)}$  értékének esetleges bizonytalansága azonban nem befolyásolja következtetéseinket, hiszen a másodrendű tag járuléka egyvegyértékű



fémek esetén nem jelentős.  $z_{\text{eff}}^s$  értékét is a II/2. fejezetben leírt módon, homogén s elektroneloszlás és „renormált” d hullámfüggvények segítségével számítottuk ki.

$z_{\text{eff}}^s R_a$ -függését a dolgozat második részében az átmeneti fémek tárgyalásakor elhanyagoltuk. A réz esetében azonban láttuk, hogy ez indokolt, hiszen  $z_{\text{eff}}^s$  mint  $R_a$  függvénye az egyensúlyi atomi sugár környezetében stacionárius, értéke közelítőleg állandónak tekinthető. Ebben a fejezetben meg fogjuk vizsgálni  $z_{\text{eff}}^s R_a$ -függésének hatását a kohéziós és rugalmas jellemzőkre mindhárom nemesfém esetében.

Modellünk tehát két illesztendő paramétert tartalmaz a d energia kifejezésében (a és b), a számításhoz szükséges további mennyiségek ( $R_c^{(1)}$ ,  $R_c^{(2)}$ ,  $R_d(r)$ ) független atomi adatok. Ezeket a mennyiségeket, valamint  $z_{\text{eff}}^s$  számított értékeit a VII. táblázat tartalmazza. A d energiában fellépő a és b paraméterek értékét az atomi sugár és a térfogati modulus egyensúlyi értékéhez történő illesztéssel határoztuk meg ( $R_a$  és B egyensúlyi értékei szintén a VII. táblázatban találhatók). A paraméterek ismeretében meghatároztuk a d energijárulékot, amit réz és ezüst esetében a 28. ábrán láthatunk. Mindkét görbe mutatja az előző fejezetben a réz esetében tapasztalt jellegzetes minimumot az egyensúlyi atomi sugár közelében.

A kohéziós energiának és a térfogati modulus nyomás szerinti deriváltjának számított és mért értékei szintén a VII. táblázatban találhatók. A táblázatból látható, hogy rézre és ezüstre az elméleti és kísérleti értékek kielégítő egyezést mutatnak, az aragnál azonban a kohéziós energia számított értéke erősen eltér a mért értéktől.

## VII. TÁBLÁZAT

Fémes és atomi bemenő adatok a nemesfémekre, valamint az  $E_c$  kohéziós energia és a térfogati modulus nyomás szerinti deriváltjának (dB/dP) számított és mért értékei. Az ezüst esetén a számítást két különböző atomi d hullámfüggvény felhasználásával végeztük el. A kísérleti értékeket zárójelbe tettük.

	Fémes bemenő adatok	Atomi bemenő adatok $R_c$ (a. u.) $R_d(r)$		$E_c$ (ry)	$\frac{dB}{dP}$
Cu	$R_a = 2,66$ a. u. $B = 1420$ kbar	1,27 <sup>a</sup> Ref. <sup>a</sup>	1,178	0,279 (0,257)	5,48 (5,59°) (7,7 <sup>f</sup> )
Ag	$R_a = 3,00$ a. u. $B = 1065$ kbar	1,60 <sup>b</sup> Ref. <sup>d</sup>	1,250	0,238 (0,218)	7,03 (6,18°)
			1,201	0,187 (0,218)	8,12 (6,18°)
Au	$R_a = 3,00$ a. u. $B = 1727$ kbar	1,70 <sup>c</sup> Ref. <sup>d</sup>	1,231	0,108 (0,278)	7,13 (6,43°)

<sup>a</sup> Solt G. and Kollár J., J. Phys. B., 5, L124, 1972.

Kollár J. and Solt G., J. Phys. B., 6, 329, 1973.

<sup>b</sup> Ref. [66]

<sup>c</sup> Ref. [68]. A Hartree—Fock és Hartree—Fock—Slater (HFS) hullámfüggvények közötti különbség az ezüst esetén  $R_c$  0,07-es megnövekedéséhez vezetett, ezért az arany esetében ezt levontuk a HFS értékből.

<sup>d</sup> Basch H. and Gray H., Theoret. chim. Acta (Berl.) 4, 367, 1966.

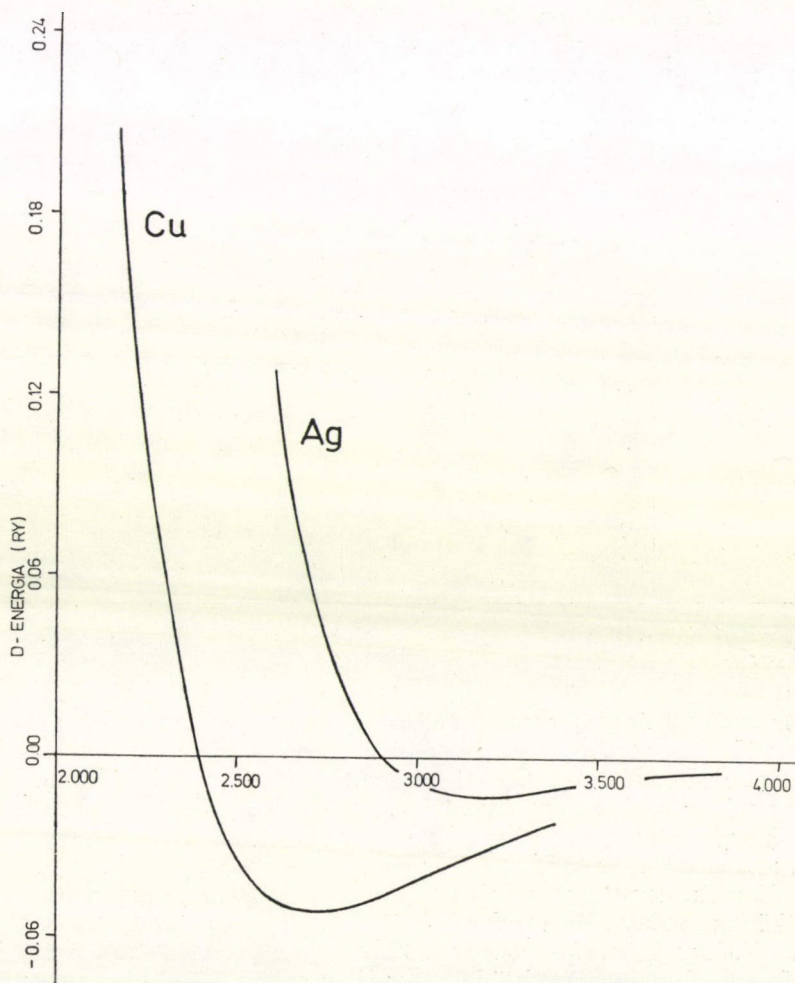
<sup>e</sup> Daniels W. B. and Smith C. S., Phys. Rev. 111, 713, 1958. (szobahőmérséklet)

<sup>f</sup> Salama K. and Alers G. A., Phys. Rev. 161, 673, 1967. (4 K)



Ez azt mutatja, hogy az arany esetében a d energiarész meghatározásánál az enyhén átfedő atomi jellegű d függvények feltételezése nem tartható fenn. (Aranyban a d-sáv jóval szélesebb mint réz vagy ezüst esetén). A táblázatban illusztráltuk az eredmények érzékenységet az atomi bemenő paraméterekben bekövetkező változásokra, így ezüst esetén kétfajta analitikus alakú atomi d hullámfüggvényből kiinduló számítás eredményét tüntettük fel. A kétféle módon kapott eredmények különbözősége mutatja a rögzített atomi hullámfüggvényeket felhasználó számítások pontosságának határait.

A VIII. táblázatban a teljes energia, a nyomás és a térfogati modulus különböző járulékait tüntettük fel a réz esetében. A táblázatból látható egyrészt, hogy a teljes



28. ábra. A (III.21) alapján számolt  $E^d$  d-energia réz és ezüst esetén. Az  $a$  és  $b$  paramétereket  $R_a$  és  $B$  megfigyelt egyensúlyi értékeihez illesztettük.

energiához a legnagyobb járulékot  $E_M + E_k^s + E_1^s + \frac{1}{2} E_{ee}^s$  adja. Másrészt, mind az  $s$ , mind a  $d$  összetevők az  $R_a = 2,66$  egyensúlyi sugárnál közel stacionárius értékkel rendelkeznek, ami a nyomásjárulékok kis értékeiben nyilvánul meg (térfogati modulus-egységekben). Az előző fejezetben tapasztaltakhoz hasonlóan tehát újból azt látjuk, hogy csak az  $s$  energiárész (ebbe most beleértjük  $E_M$ -t is) figyelembevétele már jó becslést ad az egyensúlyi atomi sugár és a teljes energia értékére, míg  $E^d$  a térfogati modulus meghatározásánál válik lényegessé.

A rugalmas állandók meghatározásánál — a szokásos módon eljárva — feltételeztük, hogy a  $d$  energia az ionok közötti centrális pár-kölcsönhatások összegeként állítható elő. Ezt a közelítést azonban óvatosan kell kezelnünk, mivel a párerő képtől való kis eltérések is jelentősen befolyásolhatják a végeredményt, hiszen  $E^d$  meghatározó jelentőségű a rugalmas állandók kialakításában. Ezt figyelembe véve nézzük most meg a rugalmas állandókra kapott eredményeinket, melyeket a *IX. táblázatban* gyűjtöttünk össze. A táblázatból látható, először, hogy  $E_2^s$  járuléka elhanyagolhatóan kicsik. Megállapíthatjuk továbbá, hogy  $z_{\text{eff}}^s$   $R_a$ -függésének figyelembevétele

### VIII. TÁBLÁZAT

A réz  $E$  teljes energiájának,  $P$  nyomásának és  $B$  térfogati modulusának különböző járuléka. A zárójelben lévő értékek a dolgozat III.1 fejezetének eredményei.

		$E_M + E_k^s + E_1^s + \frac{1}{2} E_{ee}^s$	$E_2^s$	$E^d$
$E(\text{ry})$	a)	-0,778	-0,017	-0,065
	b)	-0,778	-0,017	-0,051
		(-0,728)		(-0,035)
$P/B$	a)	0,005	-0,036	0,031
	b)	-0,003	-0,037	0,040
		(0,035)		(-0,035)
$B$ (kbar)	a)	453	-168	1135
	b)	566	-166	1020
		(790)		(630)

$$^a z_{\text{eff}}^s = z_{\text{eff}}^s(R_a^{\text{eqv}}) = 1,178$$

$$^b z_{\text{eff}}^s = z_{\text{eff}}^s(R_a)$$

kismértékben befolyásolja a rugalmas állandókra kapott eredményeinket (10—20%); a függést tekintetbe véve a számított értékek általában közelebb vannak a megfigyelt értékekhez. A réz esetében az elméleti és kísérleti értékek közötti egyezés akkor a legjobb, ha a számításnál az előző fejezetben meghatározott  $d$  energiárészt használjuk. Szembetűnő viszont a  $C$  és  $C'$  nyírási rugalmas állandókra kapott eredményeink eltérése a megfigyelt értékektől az arany esetében. A táblázat utolsó sorából azt is megállapíthatjuk, hogy ez az eltérés nem a  $d$  energia (III.21)-szerinti meghatározásának következménye. Ha a térfogatfüggő tagok mellett ugyanis csak pár-kölcsönhatásokat tételezünk fel,  $C_{12} - C_{44}$  egyenlő lesz  $B_V - 2P_V$ -vel [81], ahol a „ $V$ ” index a csak térfogattól függő tagokat jelöli az energiában; ez az összefüggés a párerők alakjától függetlenül fennáll. A Cauchy-relációtól ( $C_{12} = C_{44}$ ) mért eltérés kísérleti értékeit összehasonlítva modellünk eredményeivel megállapíthatjuk először, hogy az elméleti



értékek mind a három fém esetében közel állnak egymáshoz. Másodszor, aranyánál a megfigyelt  $C_{12}-C_{44}$  sokkal nagyobb az elméleti értéknél, ami azt mutatja, hogy itt a d energia jelentős mértékben hozzájárul  $C_{12}-C_{44}$ -hez. Megállapíthatjuk továbbá, hogy  $z_{\text{eff}}^s R_a$ -függésének figyelembevétele — ami kapcsolatos a d sűrűség nyomás alatti átrendeződésével — erősen befolyásolja  $C_{12}-C_{44}$  értékét. Megjegyezzük még, hogy  $E_2^s$  oszlopában található nem-nulla értékek arra utalnak, hogy ez a tag nemcsak párkölcsönhatásokat tartalmaz [81].

## IX. TÁBLÁZAT

A nemesfémek  $C$  és  $C'$  nyírási rugalmas állandóinak, valamint  $C_{12}-C_{44}$ -nek elméleti és kísérleti értékei. A réz esetén feltüntettük a különböző járulékokat is. A zárójelben levő értékek a dolgozat III.1. fejezetében eredményei.

	Cu						Ag		Au	
	$E_k^s + E_l^s + \frac{1}{2} E_{\theta\theta}^s E_M$			$E_2^s$	$E_d$	elm. kis.	elm.	kis.	elm.	kis.
$C$ (kbar)	a)	0	260	-26	796	1030	780		1250	
	b)	0	260	-26	695 (535)	929 (795)	692	453	1097	423
$C'$ (kbar)	a)	0	29	8	376	413	288		531	
	b)	0	29	8	319 (293)	356 (322)	238	155	429	145
$C_{12}-C_{44}-2P_i$ (kbar)	a)	159	0	-44	0	115	93		123	
	b)	295 (411)	0	-41	0	254 (411)	214	509	343	1207

$$a) z_{\text{eff}}^s = z_{\text{eff}}^s(R_a^{\text{eqv}}) = \text{const.}$$

$$b) z_{\text{eff}}^s = z_{\text{eff}}^s(R_a)$$

Végül összefoglalva megállapíthatjuk, hogy az ismertetett modell, amely az egyensúlyi atomi sugár közelében minimummal rendelkező d járulékot tartalmaz, alkalmas a réz és ezüst *térfogatfüggő* teljes energiájának leírására. A rugalmas állandók vizsgálatából kitűnik, hogy a d energiát párerők összegeként előállító modell segítségével számított értékek réz és ezüst esetén nincsenek ellentétben a rugalmas állandó mérések eredményeivel, míg a számított és mért értékek összehasonlításából arra következtethetünk, hogy itt a d energiajárulék *csak pár-kölcsönhatások* feltételezésével *nem állítható elő*.

## KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Ezúton mondok köszönetet *Solt György* kandidátusnak, akinek bíráló megjegyzései és értékes tanácsai sokat segítettek a munkámban.



## FÜGGELÉK

**Közelítő analitikus hullámfüggvények a 3d átmeneti fémekre**

Bár a jelenlegi számítási technikák lehetővé teszik „self consistent field” atomi hullámfüggvények tetszőleges pontosságú meghatározását, az egyszerű analitikus közelítések nem veszítették el jelentőségüket. Ennek az az oka, hogy szilárdtest- és molekulafizikai alkalmazásokban az atomi pályák csupán *kiindulási adatai* a számításnak. Így nyilvánvaló, hogy ezekben az alkalmazásokban az analitikus egyszerűség lényeges követelmény és ugyanakkor nem szükséges a kiinduló hullámfüggvények pontos ismerete.

Ismeretes, hogy viszonylag kis számú STO (Slater-type orbital) kombinációjaként jó közelítő hullámfüggvényeket készíthetünk. Az ehhez szükséges STO-k minimális száma  $s$  és  $p$  pályák esetén a hullámfüggvény zéróhelyeinek (kivétel az origó) számánál eggyel nagyobb. Nem ez a helyzet azonban a nagyobb impulzuszórártumú pályák, így a 3d pálya esetében, amelynek leírására nem alkalmas az egy-STO közelítés. A korábbi munkák [82]—[86] megmutatták, hogy az atomfizikai számítások szempontjából is kielégítő pontosságú közelítő hullámfüggvények készíthetők három, négy, vagy hat STO felhasználásával a vascsoport elemeinek 3d pályáira. A számítások azonban — pl. a szilárdtest-fizikai alkalmazásokban — sok esetben nem igénylik ezt a pontosságot és így a sok STO-ból felépített hullámfüggvények használata feleslegesen hosszadalmassá teszi a számolást.

A fentiek alapján hasznosnak látszott a két STO-ból felépített hullámfüggvények elkészítése a vascsoport elemeinek 3d pályáira. (Hasonló közelítést használt Fletcher [59] a nikkel esetében.) Hullámfüggvényeink paramétereit kétféle módon határoztuk meg: egyrészt közelítő hullámfüggvényeinknek a Hartree—Fock függvényekhez történő illesztésével, másrészt Hartree—Fock variációs eljárás segítségével (az utóbbi esetben a törzselektronok pályáit rögzítettnek tételeztük fel).

Közelítő hullámfüggvényeink természetesen nem érik el az előző munkák sok STO hullámfüggvényeinek pontosságát. A következőkben azonban meg fogjuk mutatni, hogy függvényeink pontossága — a rendkívül egyszerű analitikus forma mellett — sok esetben kielégítő lehet.

**1. Közelítő hullámfüggvények az  $s$  és  $p$  pályákra**

A belső  $s$  és  $p$  héjak leírására egyszerű egy-exponenciális alakot használtunk. A hullámfüggvények radiális részét a következő formában vettük fel:

$$R_{n1} = Q_{n1}(r) \exp(-\alpha_{n1}r) \quad (\text{F.1})$$

ahol  $Q_{n1}$   $(n-1)$ -ed fokú polinóm,

$$Q_{n1} = \sum_{k=1}^{n-1} A_{n1}^k \frac{(2\alpha_{n1})^{k+3/2}}{[(2k+2)!]^{1/2}} r^k \quad (\text{F.2})$$

az  $A_{n1}^k$  együtthatókat pedig úgy határoztuk meg, hogy  $R_{n1}$  ortogonális legyen az összes hasonló szimmetriájú belső pályára. (A szokásos Schmidt-féle ortogonalizálási eljárás-



rás helyett a fenti ortogonalizáció alkalmazásával sikerült megőriznünk az egy-exponenciális alakot a nullahelyekkel rendelkező belső hullámfüggvények esetében is.)

Az  $\alpha_{n1}$  árnyékolási konstansokat kétféle módon határoztuk meg:

a) *eset*

A Slater-szabály felhasználásával, azaz

$$\begin{aligned}\alpha_{1s} &= 18,70 + \xi \\ \alpha_{2s} &= \alpha_{2p} = \frac{1}{2}(14,85 + \xi) \\ \alpha_{3s} &= \alpha_{3p} = \frac{1}{3}(7,75 + \xi)\end{aligned}\quad (\text{F.3})$$

ahol  $\xi$  a d elektronok száma.

b) *eset*

Ebben az esetben az 1s, 2s és 2p héjakra a Slater-szabályt alkalmaztuk, míg a 3s és 3p héjak árnyékolási konstansainak meghatározásánál figyelembe vettük a d elektronok árnyékolását is. A Slater-szabálynak ez a módosítása indokoltnak látszik, ha figyelembe vesszük, hogy a 3s, 3p, ill. 3d pályák sűrűségmaximumai kb. ugyanazon a helyen vannak. (Itt említjük meg Gáspár [87] munkáját, aki „ab initio” módszerrel határozta meg a Slater-pályák állandóit). További módosításként a 3s és 3p pályákra különböző árnyékolási konstansokat használtunk. Az állandók értékeit úgy határoztuk meg, hogy (F.1) optimálisan írja le a megfelelő hullámfüggvényt. Így az

$$\alpha_{3p} = \frac{1}{3}(7,75 + 0,76\xi) + 0,39; \quad \alpha_{3s} = \alpha_{3p} + 0,50 \quad (\text{F.4})$$

eredményeket kaptuk. A 29. ábra példaként a réz 2p és 3s pályáira a b) eset alapján kapott eredményeinket mutatja, összehasonlítva a megfelelő Hartree—Fock hullámfüggvényekkel. Az  $A_{n1}^k$  együtthatók b) eset alapján számolt értékeit a X. táblázat mutatja a 3d sorozat elemeire.

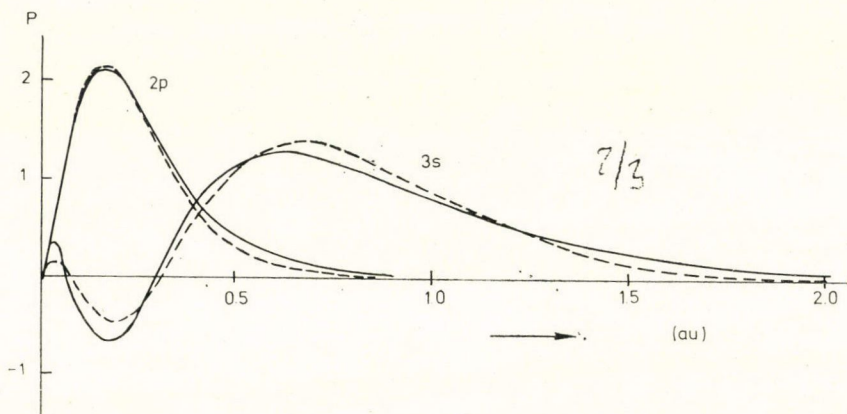
## X. TÁBLÁZAT

Az (F.2)-ben fellépő  $A_{n1}^k$  együtthatók a 3d sorozat elemeire.

Héj (n,l)	k	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
1s	0	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
2s	0	0,81830	0,82644	0,83389	0,84073	0,84703	0,85285	0,85825	0,86327
	1	-1,62113	-1,62635	-1,63110	-1,63545	-1,63944	-1,64312	-1,64651	-1,64966
2p	1	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
3s	0	0,40715	0,41410	0,42047	0,42631	0,43170	0,43668	0,44129	0,44558
	1	-2,01656	-2,03393	-2,04970	-2,06410	-2,07729	-2,08942	-2,10061	-2,11096
	2	2,41811	2,42782	2,43663	2,44464	2,45197	2,45869	2,46488	2,47060
3p	1	0,97208	0,98481	0,99628	1,00665	1,01609	1,02470	1,03260	1,03986
	2	-1,80526	-1,81463	-1,82302	-1,83060	-1,83746	-1,84371	-1,84943	-1,85468

## 2. Közelítő 3d hullámfüggvények. Illesztés a Hartree—Fock pályához

A 3d hullámfüggvényeket két STO összegeként állítottuk elő, melyeknek paramétereit úgy határoztuk meg, hogy függvényeinket illesztettük Herman és Skillman [68], módosított Hartree—Fock—Slater' hullámfüggvényeikhez. Az illesztésnél figyelembe vettük, hogy hullámfüggvényeinket a szilárdtest-fizikában, elsősorban a fémek kohéziós paramétereinek meghatározásánál kívánjuk alkalmazni, ezért arra töre-



29. ábra. A réz 2p és 3s radiális hullámfüggvényei ( $P_{nl} = rR_{nl}$ ). Az ábra a b) eset alapján kapott eredményeinket (szaggatott vonal) hasonlítja össze Synek [85] Hartree-Fock függvényeivel (vastag vonal).

kedtünk, hogy függvényeink az atomok közötti átfedés szempontjából a leglényegesebb tartományban közelítsék jól a numerikus hullámfüggvényeket. Közelítő hullámfüggvényeinket a  $3d^4s$  konfigurációnak megfelelő numerikus függvényekhez illesztettük; ezt a választást ismét a szilárdtest-fizikai alkalmazási terület indokolja [63] (mivel [68]-ben a fenti konfigurációban csak króm, nikkel és réz esetében álltak rendelkezésünkre hullámfüggvények, az illesztést ezeknél az elemeknél végeztük el).

A 3d hullámfüggvény radiális részét a következő alakban vettük fel:

$$R_{3d} = A_1 \left( \frac{(2\alpha_1)^7}{6!} \right)^{1/2} r^2 e^{-\alpha_1 r} + A_2 \left( \frac{(2\alpha_2)^7}{6!} \right)^{1/2} r^2 e^{-\alpha_2 r}. \quad (\text{F.5})$$

Az  $\alpha_1$  árnyékolási konstans értékét  $R_{3d}$  maximumának, az  $\alpha_2$  és  $A_2$  paramétereket pedig a hullámfüggvény „farkának” illesztésével határoztuk meg. Az árnyékolási konstansokra kapott eredményeink:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 0,2480\zeta + 2,580 \\ \alpha_2 &= 0,0952\zeta + 0,848. \end{aligned} \quad (\text{F.6})$$

Az  $A_2$  paraméter értékét közelítőleg állandónak találtuk a vizsgált elemeknél ( $A_2 = 0,391$ ;  $A_1$  értékét a normalizációs feltétel határozza meg.)

Vizsgáljuk meg ezután, hogy közelítő hullámfüggvényeinktől milyen pontosságot várhatunk az energiaszámításokban. Ennek érdekében kiszámítottuk néhány Coulomb



## XI. TÁBLÁZAT.

A 3d héjjal kapcsolatos atomi  $F$  integrálok értékei (rydbergekbén) a réz esetében (A 3d hullámfüggvényeket *Herman és Skillman* [68] függvényeihez történő illesztéssel határoztuk meg. A belső pályák számításánál az a) eset közelítéseit alkalmaztuk.) Eredményeinket összehasonlítottuk *Slater et al.* [88] HF és HFS eredményeivel.

	$F^0$ (1s3d)	$F^0$ (2s3d)	$F^0$ (2p3d)	$F^0$ (3s3d)	$F^0$ (3p3d)	$F^0$ (3d3d)	$F^2$ (3d3d)	$F^4$ (3d3d)
jelen számítás	2,772	2,742	2,754	2,169	2,227	1,982	0,944	0,595
HF	2,797	2,745	2,759	2,168	2,128	1,926	0,867	0,535
HFS	2,915	2,855	2,872	2,229	2,196	2,005	0,902	0,557

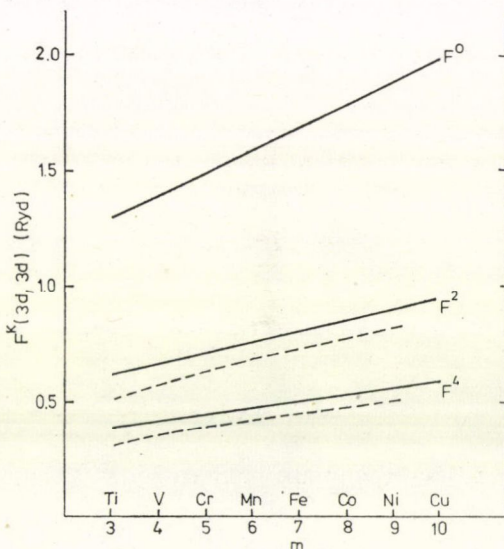
és kicserélődési integrál értékét. Az  $F^k(3d, 3d)$  Slater-integrálokat ( $k=0, 2, 4$ ) a 30. ábrán láthatjuk a rendszám függvényében. Az  $F^2$  és  $F^4$  integrálok értékeit összehasonlítottuk Watson Hartree—Fock számításának eredményeivel [83]. Az ábráról látható, hogy a Hartree—Fock eredmények rendszámfüggésének lényeges sajátosságait a közelítő számolás helyesen adja vissza.

A XI. táblázat a 3d pályával kapcsolatos  $F^0$  Coulomb integrálok, valamint az  $F^2$  és  $F^4$  kicserélődési integrálok értékeit hasonlítja össze a Hartree—Fock (HF) és Hartree—Fock—Slater (HFS) számítások eredményeivel a réz esetében [88]. A belső hullámfüggvények meghatározásánál az előző fejezet a) esetét használtuk fel. A táblázat alapján megállapíthatjuk, hogy közelítő számításunk — figyelembe véve a HF és HFS számítások eredményeinek eltérését — kielégítő eredményeket ad.

### 3. Közelítő 3d hullámfüggvények a vascsoport atomjaira és ionjaira. Variációs eljárás

A 3d hullámfüggvényt most is az (F.5) alakban vettük fel. A paraméterek meghatározásánál a szokásos HF variációs eljárást alkalmaztuk a következő korlátozásokkal:

- A variálás során csak a 3d pályát változtattuk, a belső hullámfüggvényeket (atomok esetében a 4s hullámfüggvényt is) rögzítettnek tételeztük fel;
- A „konfiguráció átlagenergiáját” minimalizáltuk [89] (ionokra a  $3d^n$ , atomokra a  $3d^n4s$  konfigurációt tételeztük fel). Ennek következtében hullámfüggvényeink kissé



30. ábra. Az  $F^k(3d, 3d)$  integrálok értékei a vascsoport atomjaira. *Herman és Skillman* [68] függvényeihez illesztett 3d hullámfüggvényeink felhasználásával kapott eredményeinket (vastag vonal)  $F^2$  és  $F^4$  esetében összehasonlítottuk *Watson* [83] Hartree—Fock eredményeivel (szaggatott vonal).

kiterjedtebbek lesznek, mintha az alapállapot multipliettjének energiáját variáltuk volna [83]. A fenti feltevések alapján tehát az

$$E_{av}^d = \sum_i^{(3d)} I(i) + \sum_{(i,j) \text{ párok}}^{(3d)} \{(ij|g|ij) - (ij|g|ji)\}_{av} \quad (F.7)$$

kifejezést kell minimalizálnunk a 3d hullámfüggvény paramétereinek függvényében, ahol az egy- és kételektron integrálokat a következő egyenletek definiálják:

$$I(i) = \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \left( -\nabla^2 - \frac{2z}{r} \right) \psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (F.8)$$

$$(ij|g|rt) = \iint \psi_i^*(\mathbf{r}_1) \psi_j^*(\mathbf{r}_2) \frac{2}{r_{12}} \psi_r(\mathbf{r}_1) \psi_t(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (F.9)$$

A (3d) jelölés arra utal, hogy az indexek közül legalább az egyik a 3d pályát jelenti, míg az „av” index az adott konfiguráció összes multipliettjére történő átlagolást jelent (z a magtöltés). Az energiát rydbergben mérjük. Egyszerű átalakítás után [89] a d átlagenergiát kifejezhetjük a radiális hullámfüggvények segítségével:

$$E_{av}^d = \xi I(3d) + \frac{\xi(\xi-1)}{2} (3d, 3d) + \sum_{i \neq 3d} \xi q_i (3d, i) \quad (F.10)$$

ahol  $i$  az  $n, l$  kvantumszámokat jelenti,  $q_i$  az  $i$ -edik héjon levő elektronok száma, a további jelölések pedig

$$I(i) = \int_0^\infty r R_i(r) \left( -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} - \frac{2z}{r} \right) r R_i(r) dr \quad (F.11)$$

$$(i, i) = F^0(i, i) - \sum_{k \neq 0} \frac{c^k(l_i 0, l_i 0)}{4l_i + 1} F^k(i, i)$$

$$(i, j) = F^0(i, j) - \sum_k \frac{c^k(l_i 0, l_j 0)}{(4l_i + 2)^{1/2} (4l_j + 2)^{1/2}} G^k(i, j). \quad (F.12)$$

Az  $F$  és  $G$  Coulomb, ill. kicserélődési integrálokat a következő egyenletek határozzák meg:

$$F^k(i, j) = \int_0^\infty \int_0^\infty R_i^*(r_1) R_j^*(r_2) R_i(r_1) R_j(r_2) \frac{2r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 \quad (F.13)$$

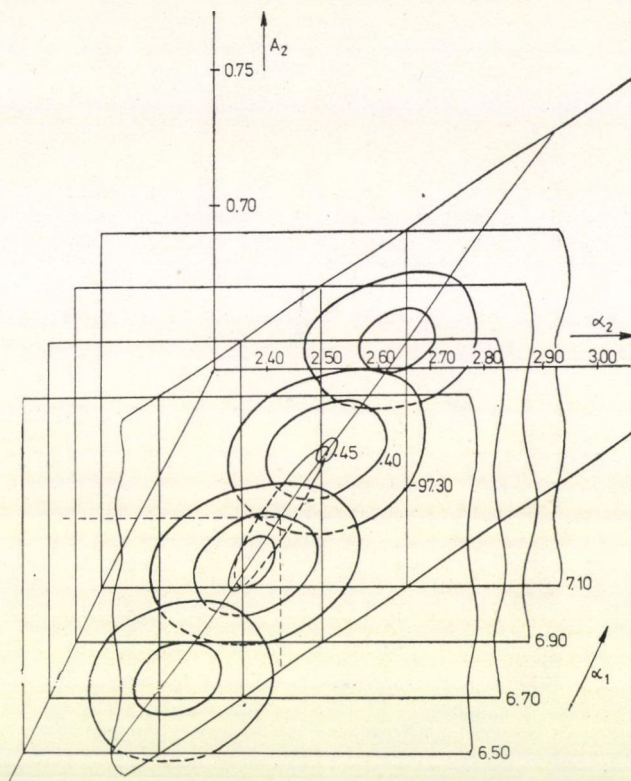
$$G^k(i, j) = \int_0^\infty \int_0^\infty R_i^*(r_1) R_j^*(r_2) R_j(r_1) R_i(r_2) \frac{2r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2$$

ahol  $r_{<}$  és  $r_{>}$  az  $r_1, r_2$  változók közül a kisebbet, ill. nagyobbát jelenti. (A  $c^k$  együtt-hatók Slater könyvében [89] található meg.)

A 31. ábra a variációs eljárást szemlélteti. Az  $\alpha_1, \alpha_2, A_2$  paraméterek három dimenziós terében konstans energiájú felületeket ábrázoltunk. Az ábrán megjelöltük azt a „kvázi stacionárius” irányt, amely mentén a paraméterek változtatásával az energia viszonylag keveset változik.



A variálás eredményeit a XII. és XIII. táblázat mutatja a 3d sorozat atomjaira és ionjaira (atomok esetében Clementi [90] 11 STO-ból felépített HF hullámfüggvényeivel írtuk le a 4s pályát. A belső hullámfüggvényeket mind az atomok, mind az ionok esetében a b) eset alapján határoztuk meg).



31. ábra. Konstans energiagörbék az  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ ,  $A_2$  paraméterek három dimenziós terében. A görbéket az  $\alpha_1 = \text{const.}$  síkokban ábrázoltuk négy különböző  $\alpha_1$  értéknél. A  $-97,450 \text{ ry}$ -hez tartozó energiagörbét a 'kvázi stacionárius' irányt tartalmazó síkban is feltüntettük. (A belső hullámfüggvényeket az a) eset alapján határoztuk meg.)

A táblázatokból látható, hogy az árnyékolási konstansokra kapott eredményeink rendszámfüggését jó közelítéssel lineárisnak tekinthetjük. Ezt a lineáris függést a következő egyenletek írják le:

$$\begin{aligned}
 &\alpha_1 = 0,34671\xi + 3,4346 \\
 \text{ionokra:} \quad &\alpha_2 = 0,15006\xi + 1,3160 \\
 &\alpha_1 = 0,35160\xi + 3,3045 \\
 \text{atomokra:} \quad &\alpha_2 = 0,15543\xi + 1,2079.
 \end{aligned}
 \tag{F.14}$$

Ezek a lineáris összefüggések  $\alpha_1$ -re és  $\alpha_2$ -re ionok esetében 0,3 %, ill. 0,6 %, míg atomok esetén 0,5 %, ill. 1 % pontossággal teljesülnek.

A táblázatokból látható, hogy az  $A_2$  paraméter értéke a d elektronszám növelésével lassan csökken, értéke kb. 7 %-ot változik a sorozaton belül. Így az előző fejezet illesztett hullámfüggvényeinek esetében indokoltnak látszik az  $A_2 = \text{const.}$  feltételezés.

## XII. TÁBLÁZAT

Az (F.5) 3d radiális hullámfüggvény paraméterei a vascsoport atomjaira. A paraméterek értékeit Hartree—Fock variációs eljárással határoztuk meg.

	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$A_1$	$A_2$
Ti	4,3067	1,6331	0,42885	0,72984
V	4,7140	1,8323	0,43661	0,71737
Cr	5,0887	2,0058	0,44325	0,70830
Mn	5,4444	2,1648	0,44920	0,70103
Fe	5,7891	2,3144	0,45437	0,69519
Co	6,1353	2,4624	0,45770	0,69131
Ni	6,4600	2,6000	0,46295	0,68600
Cu	6,7810	2,7329	0,46761	0,68155

## XIII. TÁBLÁZAT

Az (F.5) 3d radiális hullámfüggvény paraméterei a vas-csoport ionjaira. A paraméterek értékeit Hartree—Fock variációs eljárással határoztuk meg.

	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$A_1$	$A_2$
Ti	4,4487	1,7413	0,40722	0,73996
V	4,8193	1,9161	0,42006	0,72568
Cr	5,1821	2,0789	0,42862	0,71634
Mn	5,5276	2,2303	0,43587	0,70878
Fe	5,8815	2,3821	0,43976	0,70452
Co	6,2170	2,5226	0,44529	0,69931
Ni	6,5528	2,6631	0,44913	0,69558
Cu	6,8769	2,7966	0,45400	0,69119

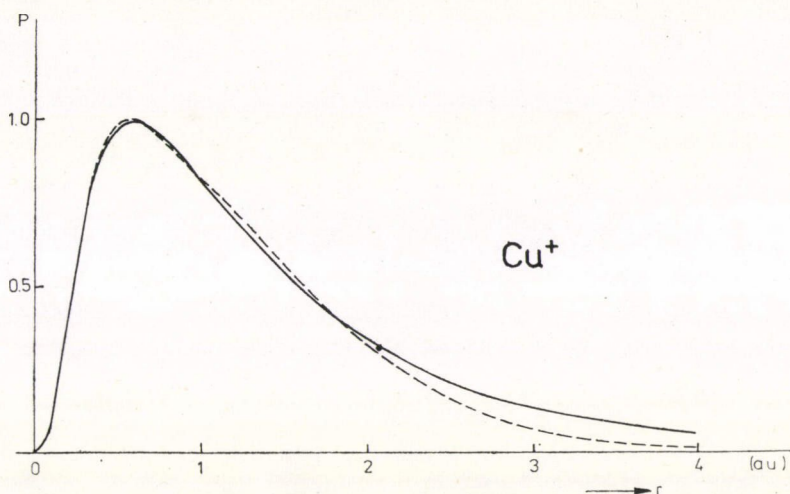
A variálással meghatározott paraméterértékek természetesen nem egyeznek az előző fejezet egymástól függetlenül illesztett paramétereinek értékével. Megjegyezzük azonban, hogy az  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ ,  $A_2$  paraméterek terében az illesztett hullámfüggvényeknek megfelelő pont közel fekszik a 31. ábrán jelzett „kvázi stacionárius” irányhoz.

A 32. ábra a variálással nyert  $P_{3d} = rR_{3d}$  radiális hullámfüggvényt szemlélteti a réz-ion esetében összehasonlítva a megfelelő HF eredménnyel. A hullámfüggvény a  $0 < r < 2$  a. u. tartományban jól egyezik a HF függvénnyel, a magtól nagy távolságra azonban kiütözközik a két STO közelítés korlátai; közelítő hullámfüggvényünk a HF függvényénél gyorsabban tart nullához. Ez a tartomány azonban — a kis elekt-



ronsűrűség következtében — nem befolyásolja lényegesen az energia-számítások eredményeit.

A 33. ábra az  $F^2$  és  $F^4$  Slater-integrálok rendszámfüggését mutatja a 3d sorozat ionjaira, összehasonlítva Watson [83] HF eredményeivel. Az a) eset alapján megha-



32. ábra. A variálással nyert  $P_{3d} = rR_{3d}$  radiális hullámfüggvény (szaggatott vonal) összehasonlítása Synek [85] Hartree—Fock eredményével (vastag vonal) a réz-ion esetében. (A belső hullámfüggvényeket a b) eset alapján határoztuk meg.)

tározott belső hullámfüggvények használata esetén tapasztalható eltérő rendszámfüggés ismét azt bizonyítja, hogy a 3s és 3p héjakat a 3d elektronok jelentős mértékben leárnyékolják. Az ábrán feltüntettük az  $F^4/F^2$  arány értékeit is Watson HF eredményeivel együtt. Ez az arány arra jellemző, hogy a hullámfüggvény mennyire tér el a hidrogénszerű alaktól (hidrogénszerű hullámfüggvények esetében  $F^4/F^2 = 0,652$ ).

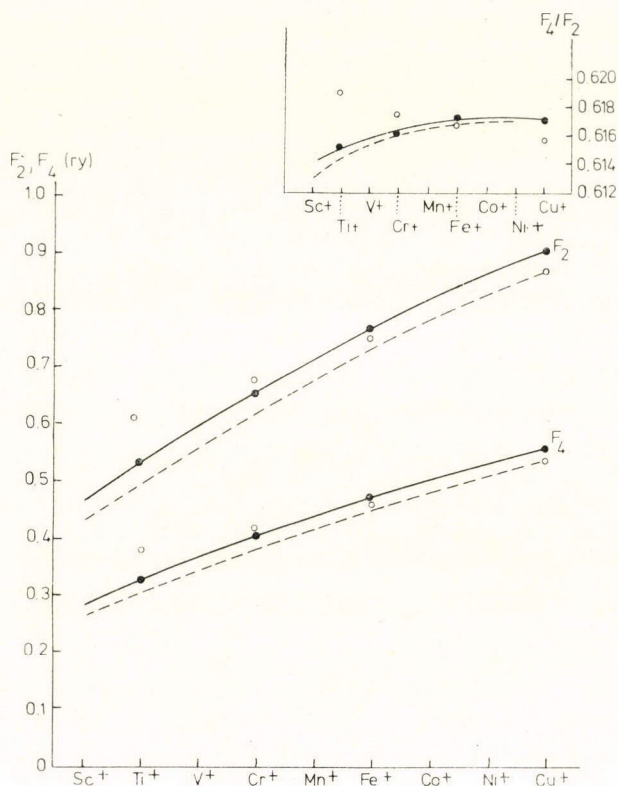
A 34. ábra a 3d egyelektron energiákra kapott eredményeinket mutatja a sorozat atomjaira és ionjaira. Az ionos számítás eredményeit összehasonlítottuk a rendelkezésre álló HF és HFS eredményekkel, valamint az ionizációs energiák kísérleti értékeivel. Az atomi értékeket Herman és Skillman [68] egyelektron energiáival

#### XIV. TÁBLÁZAT

Az  $I_{3d}$  egyelektron integrál és az  $F^0(i, 3d)$  coulomb integrálok variálással nyert értékei a réz ionra, a teljes energia d részével együtt (az energiát ry-ben mérjük). A belső hullámfüggvényeket az a) ill. b) eset alapján határoztuk meg. Eredményeinket mindkét esetben összehasonlítottuk Slater et al. [88] HF eredményeivel.

	$F^0(1s3d)$	$F^0(2s3d)$	$F^0(2p3d)$	$F^0(3s3d)$	$F^0(3p3d)$	$F^0(3d3d)$	$I_{3d}$	$E_{av}^{3d}$
a) eset	2,775	2,729	2,746	2,121	2,178	1,919	-61,866	-97,457
b) eset	2,855	2,801	2,824	2,175	2,155	1,987	-63,233	-101,024
HF	2,797	2,745	2,759	2,168	2,128	1,926	-62,159	-100,870

hasonlítottuk össze króm, nikkell és réz esetében. A HF eredményektől kissé eltérő rendszámfüggés annak a következménye, hogy a sok d elektront tartalmazó elemeknél — így különösen a sorozat végén — a d nívó nagyon érzékeny a d elektronsűrűség alakjára. Ezt mutatja a különböző HFS és HF számítások eredményeinek eltérése is.

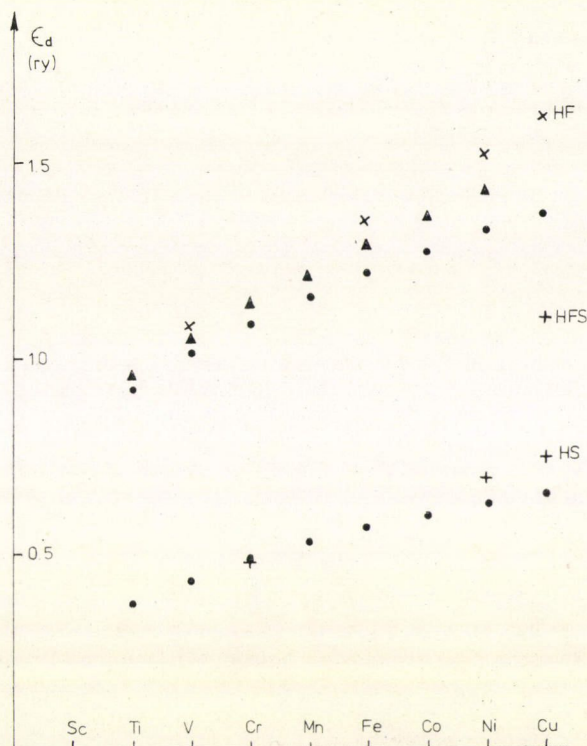


33. ábra. Az  $F^2$  és  $F^4$  Slater-integrálok értékei a vascsoport ionjaira. Eredményeinket mind az  $a$  (üres kör), mind a  $b$  esetben (telt kör és folytonos vonal) összehasonlítottuk Watson [83] Hartree—Fock számításának eredményeivel (szaggatott vonal). Az ábrán az  $F^4/F^2$  arány értékeit is feltüntettük mindkét esetben.

Végül a XIV. táblázat a réz-ionra elvégzett számítás néhány eredményét mutatja a megfelelő HF értékekkel [88] együtt.

A fenti eredmények alapján tehát megállapíthatjuk, hogy a belső héjakra alkalmazott hullámfüggvényeink ( $b$  eset), valamint az  $(F.5)$  alakú  $3d$  hullámfüggvények egyszerű alakjuk ellenére — a paraméterek helyes megválasztása mellett — megfelelő pontosságot biztosítanak az energiaszámításokban. Így alkalmasnak látszanak arra, hogy a szilárdtest- és molekulafizikai alkalmazásokban eredményesen helyettesítsék a pontos numerikus atomi hullámfüggvényeket.





34. ábra. A variálással nyert 3d egyelektron energiák a vascsoport atomjaira és ionjaira (b eset). Az ionok esetében eredményeinket összehasonlítottuk a „konfiguráció átlagenergiájának” kísérleti ▲ és HF × értékeivel [83] (a réz esetében a HFS eredményt [88] is feltüntettük). Az atomokra kapott eredményeinket Herman és Skillman [68] rendelkezésre álló értékeivel hasonlítottuk össze (HS).

# IRODALOM

1. Kollár J. and Solt G., Phonons, (Edited by M. A. Nusimovici, Proc. Int. Conf. Rennes, 1971)
2. Kollár J. and Solt G., J. Chem. Phys. Solids, 33, 651, 1972.
3. Kollár J., megjelenés előtt
4. Solt G. and Kollár J., Solid State Commun. 16, 453, 1975.
5. Solt G. and Kollár J., phys. stat. sol. (b) 71, 769, 1975.
6. Solt G. and Kollár J., Proceedings of the V-th Annual Symposium on the Electronic Structure of Metals and Alloys Gaussig, 1975. p. 64.
7. Solt G. and Kollár J., Solid State Commun. 15, 957, 1975.
8. Kollár J. and Solt G., J. Phys. Chem. Solids, 35, 1121, 1974.
9. Kollár J. and Solt G., J. Phys. Chem. Solids, 37, 123, 1976.
10. Solt G. and Kollár J., J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 5, L124, 1972.
11. Kollár J. and Solt G., J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 6, 329, 1973.
12. Kollár J., Acta Physica Hung. 39, 81, 1975.
13. Wigner E. and Seitz F., Phys. Rev. 43, 804, 1933. Phys. Rev. 46, 509, 1934.
14. Fuchs K., Proc. Roy. Soc. A153, 622, 1936.
15. Fröhlich H., Proc. Roy. Soc. A158, 97, 1937.
16. Bardeen J., J. Chem. Phys. 6, 372, 1938.
17. Kleinmann L., Phys. Rev. 146, 472, 1966.

18. Raich J. C. and Good R. H., Jr., *J. Phys. Chem. Solids*, **26**, 1061, 1965.
- Cutler M., *J. Chem. Phys.* **46**, 2044, 1967.
19. Gombás P.: *Az Atom Statisztikus Elmélete és Alkalmazásai*, Akadémia Kiadó, Budapest, 1955.
- Gáspár R., *Acta Physica Hung.*, **2**, 31, 1952.
20. Ashcroft N. W. and Langreth D. C., *Phys. Rev.* **155**, 682, 1967.
21. Heine V. in *The Physics of Metals*. (Edited by J. M. Ziman), Vol. 1. pp. 1—61, Cambridge Univ. Press. 1969).
22. Cohen M. L. and Heine V. in *Solid State Physics*. (Edited by H. Ehrenreich, F. Seitz and D. Turnbull), Vol. 24. pp. 37—248, Academic Press, New York, 1970.
23. Heine V. and Weaire D. in *Solid State Physics* (Edited by H. Ehrenreich, F. Seitz and D. Turnbull), Vol. 24. pp. 249—463, Academic Press, New York, 1970.
24. Brovman E. G., Kagan Yu. M. and Holas A., *Soviet Phys. Solid State*, **12**, 1001, 1970.
25. Brovman E. G. and Kagan Yu. M., *Usp. Fiz. Nauk.* **112**, 369, 1974, and in *Lattice Dynamics* (Edited by A. A. Maradudin and G. K. Horton), pp. 527—638, North Holland, 1974.
26. Singh S. P., *Phys. Rev. B9*, 3313, 1974.
- J. Phys. Chem. Solids, **35**, 1729, 1974.
27. Brovman E. G. and Solt G., *Solid State Commun.* **8**, 903, 1970.
28. Ross M. and Johnson K. W., *Phys. Rev. B2*, 4709, 1970.
29. Johansson B. and Rosengren A., *FOA 4 Rapport*, C 4594—A—2, 1974, and *Phys. Rev. B11*, 2836, 1975.
30. Stern F., *Phys. Rev.* **116**, 1399, 1959.
31. Shurtleff R. and Kleinman L., *Phys. Rev. B3*, 2418, 1971.
32. Fuchs K., *Proc. Roy. Soc. A151*, 585, 1935.
33. Friedel J., *Trans. Met. Soc. AIME* **230**, 616, 1964.
34. Ducastelle F. and Cyrot-Lackmann F., *J. Phys. Chem. Solids* **32**, 285, 1971.
35. Watson R. E. and Ehrenreich H., *Comments Solid St. Phys.* **3**, 109, 1970.
36. Pettifor D. G., *J. Phys. C*, **3**, 367, 1970.
37. Deegan R. A., *Phys. Rev.* **186**, 619, 1969.
38. Gschneidner K. A., Jr., in *Solid State Physics* (Edited by F. Seitz and D. Turnbull), Vol. 16. p. 395, Academic Press, New York, 1964.
39. Watson R. E., Ehrenreich H. and Hodges L., *Phys. Rev. Letters* **24**, 829, 1970.
40. Animalu A. O. E., *Phys. Rev. B8*, 3542, 1973.
41. Kambe K., *Phys. Rev.* **99**, 419, 1955.
42. Laddányi K., *Acta Physica Hung.*, **5**, 361, 1955.
- Antal J., *Acta Physica Hung.* **21**, 311, 1966.
43. Brooks H., *Nuovo Cimento Suppl.* **7**, 165, 1958.
44. Hayes T. M. and Young W. H., *Phil. Mag.* **18**, 965, 1968.
45. Boring A. M. and Snow E. C., *Journal de Physique* **33**, C3, 1972.
46. Moriarty J. A., *Phys. Rev. B6*, 1239, 1972.
47. Perrot F., *Phys. Letters* **44A**, 15, 1973.
48. Snow E. C., *Solid State Commun.* **13**, 1775, 1973.
49. Jaswal S. S. and Girifalco L. A., *J. Phys. Chem. Solids* **28**, 457, 1967.
50. Hsieh K. and Bolsaitis P. J., *J. Phys. Chem. Solids* **33**, 1838, 1972.
51. Löwdin P. O., *Adv. Physics* **5**, 1, 1956.
52. Solt Gy., *Magyar Fizikai Folyóirat*, **32**, 343, 1976.
53. Nozieres P. and Pines D., *Phys. Rev.* **111**, 442, 1958.
54. Hellmann H. and Kassatotchkin W., *J. Chem. Phys.* **4**, 324, 1936.
55. Abarenkov I. V. and Heine V., *Phil. Mag.* **12**, 529, 1965.
56. Ashcroft N. W., *Phys. Letters* **23**, 48, 1966.
57. Ashcroft N. W., *J. Phys. C*, **1**, 232, 1968.
58. Pettifor D. G., *J. Phys. C*, **2**, 1051, 1969.
59. Fletcher G. C., *Proc. Phys. Soc. A65*, 192, 1952.
60. Asdente M. and Friedel J., *Phys. Rev.* **124**, 384, 1961.
61. Hoffmann T. A. and Kónya A., *Acta Physica Hung.* **1**, 5, 1951.
62. Callaway J., *Phys. Rev.* **170**, 576, 1968.
- Lipton D. and Jacobs R. L., *J. Phys. C*, **3**, 1388, 1970.
63. Snow E. C. and Waber J. T., *Acta Met.* **17**, 623, 1969.
64. Hodges L., Watson R. E. and Ehrenreich H., *Phys. Rev. B5*, 3953, 1972.
65. Austin B. J. and Heine V., *J. Chem. Phys.* **45**, 928, 1966.
66. Richardson J. W., Blackman M. J. and Ranochak J. E., *J. Chem. Phys.*, **58**, 3010, 1973.



67. *Howland L. P.*, Phys. Rev. 109, 1927, 1958.
68. *Herman F. and Skillman S.*, Atomic Structure Calculations New Jersey, Prentice Hall, 1963.
69. *Keeler R. N. and Kennedy G. C.* in American Institute of Physics Handbook, McGraw-Hill, New York, 1972.
70. *Altshuler L. V., Bakanova A. A. and Trunin R. F.*, Zh. Eksperim. i Teor. Fiz. 42, 91, 1962.
71. *Schmit J. and Lucas A. A.*, Solid State Commun. 11, 419, 1972.
72. *Hafemeister D. W.*, J. Phys. Chem. Solids 30, 117, 1969.
73. *Dick B. G. and Overhauser A. W.*, Phys. Rev. 112, 90, 1958.
74. *Heine V.*, Phys. Rev. 153, 673, 1967.
75. *Pettifor D. G.*, J. Phys. C, 5, 97, 1972.
76. *Lipari N. O. and Deegan R. A.*, Solid State Commun. 9, 1481, 1971.
77. *Lundqvist S.*, Arkiv för Fysik 8, 177, 1954.
78. *Overton W. C. and Gaffney J.*, Phys. Rev. 98, 969, 1955.
79. *Schneiderman S. B. and Michels H. H.*, J. Chem. Phys. 42, 3706, 1965.
80. *Snow E. C. and Waber J. T.*, Phys. Rev. 157, 570, 1967.
81. *Brovman E. G. and Kagan Yu. M.*, ZhETF, 57, 1635, 1969.
82. *Löwdin P. O. and Appel K.*, Phys. Rev. 103, 1746, 1956.
83. *Watson R. E.*, Phys. Rev. 118, 1036, 1960.
84. *Watson R. E.*, Phys. Rev. 119, 1934, 1960.
85. *Synek M.*, Phys. Rev. 131, 1572, 1963.
86. *Minor J. M. and Mires R. W.*, Phys. Rev. A3, 1937, 1971.
87. *Gáspár R.*, Acta Physica Hung. 2, 151, 1952.
88. *Slater J. C., Wilson T. M. and Wood J. H.*, Phys. Rev. 179, 28, 1969.
89. *Slater J. C.* Quantum Theory of Atomic Structure, New York, McGraw-Hill, 1960.
90. *Clementi E.*, J. Chem. Phys. 41, 295, 1964.





# A KVANTUMELEKTRODINAMIKA GLOBÁLIS JELLEMZÉSE TÉRIDŐ RÁCSON\*

PATKÓS ANDRÁS  
ELTE, Atomfizikai Tanszék

## Bevezetés

A kvantumelektrodinamika a legsokoldalúbban vizsgált fizikai elméletek egyike. Alapvető módszere, az elemi töltés empirikus kicsinységén alapuló perturbációszámítás kiemelkedő pontosságú kísérletek eredményét jósolta meg, fontos gyakorlati eszközök fizikai alapelveinek „megtervezését” tette lehetővé.

Miért foglalkozunk vele a jelen cikkben mégis újból, méghozzá egy szokatlan számítási módszer felhasználásával? Az ok hármas.

Egyrészt az elektrodinamika perturbatív kezelésének a renormálással társított sikere ellenére az effektív csatolási állandó távolság (impulzus)-függése nem megnyugtatóan tisztázott (Landau-paradoxon). A téridő rácsnak, mint egy ideiglenes hosszegységnek a bevezetése e kérdés vizsgálatában is segítséget nyújthat.

Szorosan e kérdéshez kapcsolódik egy másik. Vajon a csatolási állandó esetleges más értékeinél elképzelhető-e az elektrosztatikus kölcsönhatás erőtvényének (Coulomb-törvény) megváltozása, az elektromágneses tér átalakulása egy másjellegű „fázisba”? A „fázisok” jellemzésére használt rendparaméter és a csatolási állandó kapcsolatának felkutatása jelenti a címbe foglalt „globális jellemzés” kifejezés konkrét tartalmát. E tekintetben az elektrodinamika vizsgálata modellként szolgálhat a bonyolultabb, nem-kommutatív vektorterek elméletében elvégzendő analóg számításokhoz.

Végül a vektorpotenciálnak más fizikai jelentést adva, bizonyos elképzelések szerint, a rendszer a statisztikus fizikában is interpretálható új típusú anyagok (spinűvek) alkotórészei közti kölcsönhatások leírására.

Ebben a cikkben az alkalomhoz igazodva a statisztikus fizikai nyelvhez kívánunk közeledni, miközben a fázisátalakulások kérdésére keressük a választ. Az I. fejezetben a modell definíciójával, más statisztikus fizikai rendszerekhez való kapcsolatával és a rendparaméter definiálhatóságával foglalkozunk. Rámutatunk, hogy a rendparaméter lényegében két távoli töltés kölcsönhatási energiájának felel meg. Így a fázisátalakulás kérdése az aszimptotikusan szabad töltések létezésének kérdésévé fogalmazható át. A II. fejezetben ezt a kérdést a csatolási állandó ( $g^2a$ ) nagy értékeire vizsgáljuk, előbb  $T=0$ -ra, majd  $T$  véges értékeire. A III. fejezet a  $g^2a \ll 1$  gyenge csatolási határeset vizsgálatával foglalkozik.

A cikk egyszerűsítési okokból főleg a  $2+1$  dimenziós elmélettel foglalkozik, de az eredmények és módszerek közül több általánosítható egyéb dimenziókra is.

\*Előadás az 1978. évi Statisztikus Fizikai Iskolán.  
Érkezett 1978. okt. 6.



## I. A modell általános leírása

### *Az abeli mértékelmélet definíciója téridő-rácson*

A statisztikus fizikai modellek megszokott osztályai valamilyen globális transzformációval szemben szimmetrikusak. Tehát a rácspontokban definiált dinamikai változók mindegyikén *ugyanazt* a transzformációt végezve el, a Hamilton-függvény nem változik.

Példaként tekinthetjük a  $d$  dimenziós klasszikus planáris modellt, amelynek Hamilton-függvénye a következő:

$$-\frac{1}{k_B T} \mathcal{H}(\{\varphi\}) = \sum_{\langle x, y \rangle} K \cos(\varphi(x) - \varphi(y)). \quad (1.1)$$

A  $\varphi(x)$  forgásszögekkel jellemzett  $x$  pontbeli rotátor szomszédaival hat kölcsön, azaz  $x$  és  $y$  olyan pájraira vonatkozik az összegzés, melyek különbsége egységnyi rácsvektorral egyezik meg. Ha az összes rotátort közös  $\alpha$  szöggel forgatjuk el ( $\varphi' = \varphi + \alpha$ ), nyilván fennáll a  $\mathcal{H}(\{\varphi\}) = \mathcal{H}(\{\varphi'\})$  egyenlőség.

Ebben az előadásban általánosabb szimmetriatranszformációkkal szemben szimmetrikus modellek egy speciális érdekességű képviselőjéről lesz szó. Olyan modellt építünk fel, amely egyetlen pontban elvégzett forgatással szemben is invariáns. Ha a forgatás a síkbeli,  $U(1)$  csoporttal írható le, akkor azt mondjuk, hogy a rendszeren *lokális abeli mértéktranszformációk* hajthatók végre anélkül, hogy a termodinamikai mennyiségek változnának.

A modell megszerkesztése a következőképpen történik. A rotátort most nem rácspontokhoz, hanem a két pontot összekötő élhez rendeljük hozzá. A  $\varphi$  szöget irányított mennyiségként definiáljuk, és fennáll a

$$\varphi(x, x + e_i) = -\varphi(x + e_i, x) \quad (1.2)$$

összefüggés, ahol  $e_i$  az  $i$ -dik irányba mutató rácsvektort jelöli. A  $\varphi$  változó forgási transzformációját az él két végén elvégzett forgatások szögeinek különbsége adja meg:

$$\varphi'(x, x + e_i) = \varphi(x, x + e_i) + \alpha(x + e_i) - \alpha(x). \quad (1.3)$$

Tekintsük az  $(e_i, e_j)$  rácsvektorok által kifeszített síkot és minden négyzethez rendeljük hozzá a következő kombinációt:

$$\begin{aligned} \Gamma_{ij}(x) = & \varphi(x, x + e_i) + \varphi(x + e_i, x + e_i + e_j) - \\ & - \varphi(x + e_j, x + e_i + e_j) - \varphi(x, x + e_j). \end{aligned} \quad (1.4)$$

Az (1.4) változók invarianciája az (1.3) transzformációkkal szemben nagyon egyszerűen belátható. A legáltalánosabb forgatás az egyes rácspontokban egymástól függetlenül elvégzett forgatások lineárkombinációja. Így elegendő azt az esetet vizsgálni, mikor egyetlen pontban történik csak forgatás. Miután  $x$ -ből (1.4) szerint egy befutó és egy kifutó él játszik szerepet  $\Gamma$ -ban, így  $\alpha(x)$  kétszer szerepel, de ellenkező előjellel.



Ezek után az (1.1)-t általánosító, lokális forgatásokkal szemben is invariáns Hamilton-függvény a következő [1]:

$$\frac{1}{k_B T} \mathcal{H}(\{\varphi\}) = \sum_{i,j} \sum_{\square_j} K(1 - \cos \Gamma_{ij}(x)). \quad (1.5)$$

Miért tanulmányozzák elég kiterjedten (1.5)-öt vagy a más szimmetriacsoportot tartalmazó, de hasonlóan felépített modelleket?

Először is elképzelhető, hogy valóságos rendszerek ilyen szimmetriát mutatnak (spin-üvegek, frusztráció [2]). Másodszor (1.5) a rácsállandóval nullához tartva kapcsolatba hozható a jólismert elektrodinamikai hatással, azaz (1.5), mint a téridő-rácson definiált elektrodinamika is értelmezhető.

A  $(-\pi, \pi)$  intervallumon definiált  $\varphi$  szögek és az elektrodinamikai vektorpotenciál közti megfeleltetés a következő:

$$\varphi(x, x+e_i) = a g A_i(x). \quad (1.6)$$

Itt  $g$  az elemi töltés és  $a$  a cella állandó. Így  $A_i(x)$  az első Brillouin zónában változik, amely  $a \rightarrow 0$ -ra végtelen értékeket enged meg, amint az szokás. (1.6)-t (1.4)-be helyettesítve az  $a \rightarrow 0$  limeszben

$$\Gamma_{ij}(x) \approx a^2 g \left( \frac{\partial A_i}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial x_i} \right) = a^2 g F_{ij}(x) \quad (1.7)$$

adódik, ahol  $F_{ij}$  a megszokott térerősség-tenzor, csakhogy most minden irány térszerű! (1.5)-ben a koszinuszt  $a$  kicsinysége miatt sorbafejtjük (itt derül ki az abban definiált konstans értelme):

$$\frac{1}{k_B T} \lim_{a \rightarrow 0} \mathcal{H}(\{\varphi\}) = \sum_{i,j} K \sum_x \frac{F_{ij}^2}{2} a^4 g^2 + O(a^8). \quad (1.8)$$

Ahhoz, hogy az első tagból a  $d$  dimenziós elektrodinamikai hatást kapjuk  $K$ -t

$$K = \frac{1}{2g^2 a^{4-d}} \quad (1.9)$$

alakúnak választjuk. Ez a választás egyben biztosítja a sorfejtés további tagjainak eltűnését az  $a \rightarrow 0$  határesetben.

A kapott kifejezés az euklidészi metrikájú térben érvényes elektrodinamika hatás-függvénye. Ezt a Minkowski-térbeli elmélettel reményeink szerint analitikus folytatás köti össze, amely a képzetes időt valósba viszi vissza.

A fenti gondolatmenet a klasszikus Hamilton-függvényen elvégzett határátmenettel jutott el a kontinuum elmélettel való megfeleltetéshez. Valójában a limeszt a kvantumelmélet rácson történő megoldása után kell elvégezni, így a fenti összekötés csak „vagytieli képzelgés” egyelőre.

Az (1.5) Hamilton-sűrűséggel felírt állapotösszeg definiálja a rendszer termodinamikáját:

$$Z = \int_{-\pi}^{\pi} \left( \prod_{\text{minden vonalra}} \frac{d\varphi}{2\pi} \right) \exp \left\{ K \sum_{ij} \sum_i (\cos \Gamma_{ij} - 1) \right\} \quad (1.10)$$

(1.10) a kvantumtérelmélet nyelvén az euklidészi metriájú rácrendszer Green-függvényeit generáló funkcionál [3].

### *Leképezés $d-1$ dimenziós kvantumrendszerre*

A továbbiakban háromdimenziós rendszert vizsgálunk. Az egyik (a 0 indexű) koordinátát „idő”-nek nevezzük és ennek rácállandójával ( $a_0$ ) nullához tartunk [4]. Minthogy a rács izotrópiája megszűnik, néhány korábbi definíciót módosítanunk kell:

$$\varphi(x, x+e_0) = a_0 g A_0(x), \quad \varphi(x, x+e_i) = a g A_i(x), \quad (1.11)$$

illetve

$$K_t = \frac{1}{2g^2 a^{3-d} a_0}, \quad K_x = \frac{a_0}{2g^2 a^{5-d}}. \quad (1.12)$$

A mértékszabadságot arra használjuk, hogy az  $e_0$  irányú éleken minden  $\varphi$  szögnek előre meghatározott értéket adjunk. Ez lehetséges, hiszen ezen élek száma éppen azonos a rácspontok, azaz a független forgatások számával. Így mostantól használhatjuk pl. a

$$\varphi(x, x+e_0) = 0 \quad (1.13)$$

megkötést. Megjegyezzük, hogy (1.13) tiszteletben tartásával további, több rácspont-beli, összehangolt forgatásra még van lehetőség. Ugyanis egy rácspont „időtörténet” kijelölő egyenes menti pontokban végezhető úgy forgatás, hogy az  $x_0 = na_0$ -beli transzformáció (1.13)-t sértő jellegét az  $x_0 = (u+1)a_0$ -beli kompenzálja, de a térirányokban ez a kiejtés nem következik be. Ez a transzformációsorozat felel meg a folytonos elmélet csak térszerű változókat érintő transzformációinak.

(1.13) miatt az (1.5) Hamilton-függvény felírható az egyes „időpontokhoz” tartozó síkokon belüli kölcsönhatások és a szomszédos síkok közti kölcsönhatások Hamilton-függvényeinek összegeként:

$$\frac{1}{k_B T} \mathcal{H}(\{\varphi\}) = \sum_n H_{\text{sík}}(x_0 = na_0) + \sum_n H_{\text{int}}(na_0, (n+1)a_0),$$

ahol

$$H_{\text{sík}} = \sum_{\substack{\square^2 \\ 1}} K_x (1 - \cos \Gamma_{12}(x, x_0 = na_0))$$

$$H_{\text{int}}(na_0, (n+1)a_0) = \sum_{i=1}^2 \sum_{\substack{\square \\ i}} K_t [1 - \cos(\varphi(x, x+e_i) - \varphi(x+e_0, x+e_0+e_i))]. \quad (1.14)$$



Az (1.10) állapotösszeg ezek után úgy tekinthető, mint az

$$\exp \{H_{\text{sfk}}(x_0 = (n+1)a_0) + H_{\text{int}}(na_0, (n+1)a_0)\}$$

folytonos ( $\varphi$ ) indexű mátrixok szorzatának spurja.\* Ezért definiálva a következő sajátérték-feladatot (a transzfer-mátrix sajátérték egyenlete):

$$\begin{aligned} & \exp \{-H_{\text{sfk}}(x_0 = (n+1)a_0)\} \int_{-\pi}^{\pi} \left( \prod_{\varphi \in x_0 = na_0} \frac{d\varphi}{2\pi} \right) \cdot \exp \{-H_{\text{int}}(\varphi(x_0 = \\ & = na_0), \varphi(x_0 = (n+1)a_0))\} \Psi(\varphi(x_0 = na_0)) = \lambda \Psi(\varphi(x_0 = (n+1)a_0)), \end{aligned} \quad (1.15)$$

az  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetben  $Z$  (1.15) legnagyobb sajátértékével fejezhető ki:

$$Z = \lambda_0^N,$$

ahol  $N$  a síkok száma. (1.15) bal oldalán az integráloperátorról könnyen felismerhető, hogy  $M$  egydimenziós  $XY$ -lánc transzfer-mátrixának direkt szorzata ( $M$  a síkbeli rácspontok száma).

Fejtsük ki  $\Psi(\varphi(x_0 = na_0))$ -t az egydimenziós transzfermátrixok sajátfüggvényeinek direkt-szorzat-bázisán ( $\otimes \prod_{i=1}^M e^{in_i \varphi_i}$ ) Az ismert egydimenziós megoldás [5] segítségével

$$\begin{aligned} & \int_{-\pi}^{\pi} \left( \prod_{\varphi \in x_0 = na_0} \frac{d\varphi}{2\pi} \right) \exp \{-H_{\text{int}}\} \Psi(\varphi(x_0 = na_0)) = \\ & = \sum_{\{n_i = -\infty\}}^{\infty} \prod_i^M [I_{n_i}(K_t) e^{-K_t} e^{in_i \varphi_i}] \tilde{\Psi}(\{n_i\}), \end{aligned} \quad (1.16)$$

ahol  $\tilde{\Psi}(\{n_i\})$  a sajátfüggvény kifejtési együtthatóit jelöli.

Az  $a_0 \rightarrow 0$  limeszben felhasználjuk, hogy  $K_t \rightarrow \infty$  és így  $I_{n_i}(K_t)$  aszimptotikus kifejezésével helyettesíthető:

$$\lim_{K_t \rightarrow \infty} I_{n_i}(K_t) \sim \frac{e^{K_t}}{(2\pi K_t)^{1/2}} e^{-\frac{n_i^2}{2K_t}}. \quad (1.17)$$

Ekkor (1.16) jobb oldala a

$$\sum_{\{n_i\}} \prod_i \left[ \frac{1}{(2\pi K_t)^{1/2}} e^{-\frac{n_i^2}{2K_t}} e^{in_i \varphi_i} \right] \tilde{\Psi}(n_i)$$

alakot ölti, ami tovább írható a

$$\begin{aligned} & \sum_{\{n_i\}} \prod_i \left[ \frac{1}{(2\pi K_t)^{1/2}} \exp \left( \frac{1}{2K_t} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2} \right) e^{in_i \varphi_i} \right] \tilde{\Psi}(n_i) = \\ & = \exp \left\{ \frac{1}{2K_t} \sum_i^M \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2} \right\} \Psi(\{\varphi_i(x_0 = (n+1)a_0)\}) (2\pi K_t)^{-M/2} \end{aligned}$$

\* A  $\mathcal{H}$ -ban lerögzített értékű változókra való funkcionálösszegzés 1-t ad!

alakba. Ezzel (1.15) lokális sajátértékproblémává alakult

$$(2\pi K_t)^{-M/2} \exp \{-H_{\text{sik}}(x_0 = (n+1)a_0)\} \exp \left\{ \frac{1}{2K_t} \sum_i^M \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2} \right\} \Psi(x_0 = (n+1)a_0) = \lambda \Psi(x_0 = (n+1)a_0). \quad (1.18)$$

(1.18) bal oldalán a két operátor nem cserélhető fel, de  $a_0 \rightarrow 0$ -ra elég sorfejtésük lineáris tagjára korlátozódni, azaz a bal oldali operátor  $\lambda' = \lambda(2\pi K_t)^{M/2}$  definíció után  $1 - \hat{H}a_0$  alakban írható:

$$\hat{H} = -g^2 \sum_{i=1}^M \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2} + \frac{1}{2g^2 a^2} \sum_{\square^2} (1 - \cos \Gamma_{12}(x_0 = (n+1)a_0)). \quad (1.19)$$

A transzfer-operátor tehát a folytonos, imaginárius idejű modell infinitezimális időfejlesztő operátorába megy át.

Az  $\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi_i}$  az  $i$ -dik vonal forgásainak generátora, ezért (1.19)-beli generátort  $L(x, x+e_i)$ -vel jelölve azt kapjuk, hogy

$$\hat{H} = +g^2 \sum_{xi} L^2(x, x+e_i) + \frac{1}{2g^2 a^2} \sum_{\square^2} (1 - \cos \Gamma_{12}). \quad (1.20)$$

Az (1.20) operátorról nyilvánvaló, hogy felcserélhető bármelyik pontbeli forgatással, amely csak a szomszédos négy síkbeli rotátorra hat, tehát

$$\left[ \sum_{i,\pm} L(x, x \pm e_i), \hat{H} \right] = 0.$$

Miután a rendszert forgásinvariánsan építjük ki, így Hilbert terének azt a részét nevezzük fizikainak, amelyre

$$\sum_{i,\pm} L(x, x \pm e_i) |\Psi\rangle = 0. \quad (1.21)$$

Mi (1.21) fizikája? Az  $L(x, x+e_i)$  operátor a  $\Phi(x, x+e_i)$  változóhoz konjugált impulzus. Miután  $\varphi$  a vektorpotenciállal arányos,  $L$  az elektromos térerősséget tartalmazza. A kapcsolatot az egyidejű kommutátorok összehasonlításából állapíthatjuk meg:

$$[L(x, x+e_i), \varphi(y, y+e_j)] = \frac{1}{i} \delta_{ij} \delta_{x,y}$$

$$[E(x, x+e_i), A(y, y+e_j)] = \frac{1}{i} \delta_{ij} \frac{1}{a^3} \delta_{x,y}$$

(u. i.  $a \rightarrow 0$  esetén  $\frac{1}{a^3} \delta_{x,y}$  mennyiség megy át  $\delta(x-y)$ -ba).

Ebből

$$L(x, x+e_i) = \frac{a^2}{g} E(x, x+e_i) \quad (1.22)$$



tehát  $L$  sajátértékei az elektromos fluxust mérik  $g$  egységekben. (1.21) a Gauss-tételt fejezi ki zérus töltésű rácson.

Végeredményben kvantumrotátorok kétdimenziós rendszerét kaptuk, amelynek legalacsonyabb energiaértéke (a rendszer alapállapotának energiája) van kapcsolatban az eredeti feladat állapotösszegével.

### *Az abeli mértékelmélet fázisainak jellemzése*

Az (1.1) típusú globális szimmetriájú elméletek fázisait a rendparaméter(ek) zérus, illetve attól különböző értékei jellemzik. Az egyes fázisok homogénok, ezért rendparaméterként valamely változó egyetlen pontbeli értékének várható értéke is szolgálhat. A rácson definiált mértékelméletekről szóló első cikkeken a rendszerek fázisainak ugyanilyen jellemzésével próbálkoztak, az abeli esetben  $\langle \cos(\varphi(x, x+e_i)) \rangle$ -t választva rendparaméterül. 1975-ben S. Elitzur [6] megmutatta, hogy azokban a lokális szimmetriájú elméletekben, amelyekben nem használnak explicit szimmetriasértő mechanizmust (pl. Higgs-hatást) a fenti átlag mindig szigorúan nulla.

Ebben a fejezetben Elitzur levezetésének a tiszta mértékterekhez igazított változatát mutatjuk be és rámutatunk a globális szimmetriájú elméletektől való eltérés okára is. Wilson nyomán később definiáljuk és értelmezzük a rendet(-lenséget) jellemző nemlokális paramétert.

Az (1.10) kifejezés konvergenciája érdekében az átlagok számolásakor (nem mértékinvariáns) külső forrásokat is bevesznek, majd a termodinamikai limesz ( $N \cdot M \rightarrow \infty$ ) elvégzése után e források intenzitásával nullához tartanak. Ez az eljárás felel meg a spontán mágnesezettség visszamaradásának, mikor egy makroszkopikus mágnest ( $NM \rightarrow \infty$ ) külső térbe raknak és vizsgálják ez utóbbi csökkenésekor fellépő jelenségeket. Tehát

$$Z(J, M \cdot N) = \lim_{J \rightarrow 0} \lim_{M \cdot N \rightarrow \infty} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{x,i} \frac{d\varphi}{2\pi} \exp(-\mathcal{H}(\varphi)) \exp\left(J \sum_{x,i} \cos(\varphi(x, x+e_i))\right) \quad (1.23)$$

$$\begin{aligned} \langle \cos \varphi(y, y+e_k) \rangle &= \lim_{J \rightarrow 0} \lim_{M \cdot N \rightarrow \infty} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{x,i} \frac{d\varphi}{2\pi} \exp(\mathcal{H}(\varphi)) \frac{1}{Z(J, M \cdot N)} \times \\ &\times \cos \varphi(y, y+e_k) \exp\left(J \sum_{x,i} \cos \varphi(x, x+e_i)\right). \end{aligned} \quad (1.24)$$

Már korábban kihasználtuk, hogy minden  $\varphi$ -eloszláshoz van olyan mértéktranszformáció, amellyel egy meghatározott vonalon  $\varphi$  értéke nullává tehető. Legyen ez most éppen az  $x = y + ne_k$  vonal, azaz

$$\alpha(x) = 0, \quad \text{ha } x \neq y \quad \text{és} \quad \alpha(y) = \varphi(y, y+e_k).$$

Az új szögértékek így

$$\begin{aligned} \Psi(x, x+e_i) &= \varphi(x, x+e_i), \quad \text{ha } x \neq y \\ \Psi(y, y+e_i) &= \varphi(y, y+e_i) - \varphi(y, y+e_k) \end{aligned} \quad (1.25)$$



(1.25) alapján

$$\int \prod_{x,i} \frac{d\varphi}{2\pi} = \int \prod_{(x,i) \neq (y,k)} \frac{d\psi(x, x+e_i)}{2\pi} \int \frac{d\varphi(y, y+e_k)}{2\pi}$$

$$\mathcal{H}(\varphi) = \mathcal{H}(\Psi).$$

Válasszuk le (1.24)-nek az új változóiban felírt alakjából a  $\varphi(y, y+e_k)$  — integrált

$$I = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \cos \varphi \exp \left\{ J \sum_{i \neq k} \cos (\Psi(y, y+e_i) + \varphi) \right\} \quad (1.26)$$

$J=0$ -ra az integrál zérus és az exponenciális faktor regularitása miatt az is világos, hogy minden  $\varepsilon$ -hoz van olyan  $J$ , amelyre  $|I| < \varepsilon$ . (1.26) leválasztása után majdnem  $Z(J, N)$  marad vissza (1.24)-ben, ehhez még a

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\varphi(y, y+e_k)}{2\pi} \exp \left\{ J \sum_{i \neq k} \cos [\Psi(y, y+e_i) + \varphi(y, y+e_k)] \right\}$$

tényezővel történő bővítés szükséges. Ez az integrál az exponens legkisebb értékét véve figyelembe biztosan nagyobb mint  $\exp [-J(2d-1)]$ . Ezzel a

$$\langle \cos \varphi(y, y+e_k) \rangle \leq \varepsilon e^{J(2d-1)} \quad (1.27)$$

becslésre jutunk elég kicsiny  $J$ -re.

Miben különbözik a fenti levezetés globális szimmetriájú modell esetén? Képezzük  $\langle \cos \varphi_0 \rangle$ -t, majd végezzünk el egy  $-\varphi_0$  szögű forgatást. Az átlag kifejezésében a  $\varphi_0$  — integrál a következő:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\varphi_0}{2\pi} \cos \varphi_0 \exp \left\{ J \left( \sum_{i \neq 0}^{N \cdot M} \cos (\varphi_0 + \Psi_i) - 1 \right) \right\}.$$

Miután az  $MN \rightarrow \infty$  limesz elvégzése megelőzi a  $J \rightarrow 0$  határátmenetet, az exponenciális faktor nem reguláris többé. Így (1.27) típusú becslés nem vezethető le.

A különbség a szimmetriatranszformációba bevont szabadsági fokok eltérő számából adódik. A  $\varphi_0$  szögű elfogás hatására, ha  $J \gg 1$  minden szög  $\varphi_0$  körül fluktuál a globális elméletben. Ugyanez a transzformáció a mértékelmélet esetén csak néhány szomszédot érint, így a többi tetszőleges  $J$ -re ezektől függetlenül ingadozik. A fluktuációk lényeges volta a spontán szimmetriasértés elmaradásában analóg a 2-dimenziós planáris modellre vonatkozik tétellel; amely tetszőleges  $T$ -re  $\langle m \rangle = 0$ -t ír elő. Elitizur észrevételét tetszőleges nem-mértékinvariáns mennyiség várható értékére alkalmazni lehetne, ugyanakkor egy lokális invariáns csak a triviális egységgel lehet arányos.

E helyzet megoldására Wilson [1] javasolta a következő mértékinvariáns mennyiség átlagát a fázisok jellemzésére.

$$\exp \left[ i \sum_{x \in C} \varphi(x, x+e_i) \right] \quad (1.28)$$



ahol  $C$  az 1. ábrán látható, az „idő-tengelyt” tartalmazó síkban elhelyezkedő kontúr. (1.28) várható értékének aszimptotikus változását vizsgálják, ha a kontúr által határolt terület végtelenhez tart. Ha rotátorok szöge közel van egymáshoz, akkor az ellentétes irányítottaságú útelemek kiejtik egymást, tehát a várható érték a kerület növekedésével viszonylag lassan csökken. Ha a rotátorok rendezetlenül állnak, de ez a rendezetlenség bizonyos rövidtávú korrelációt takar (vortexek stb.), akkor a csökkenés gyorsabb (1.2. ábra). Kvalitatíven két különböző fázisról beszélünk, ha a várható érték a csatolási állandó egyik tartományában

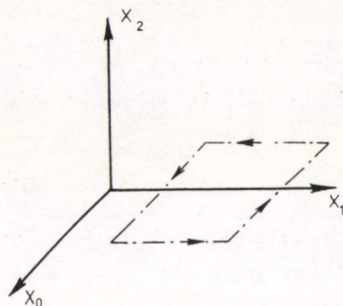
$$\langle \exp \{ i \sum_C \varphi(C) \} \rangle \sim \exp(-\text{kerület}(C)),$$

a másikban

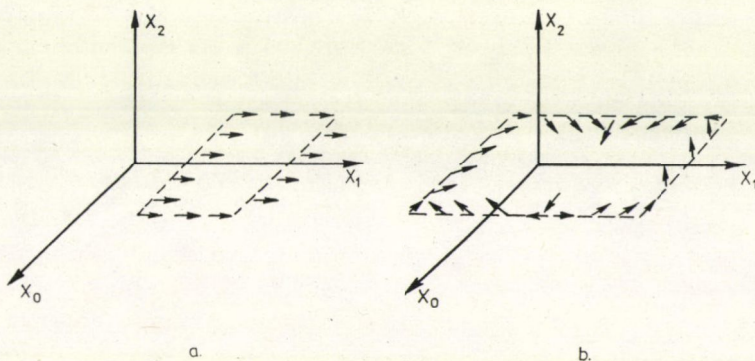
$$\langle \exp \{ i \sum_C \varphi(C) \} \rangle \sim \exp(-\text{terület}(C))$$

viselkedést mutat. A fentiek alapján az utóbbit nevezhetjük rendezetlenebb fázisnak.

Mi a Wilson-féle rendparaméter fizikai interpretációja?  $\langle \exp \{ i \sum_C \varphi(C) \} \rangle$  kvantumtérelméletileg azt a folyamatot írja le, amikor a vákuumból  $t = -\frac{T}{2}$ -kor keletkezett egy egységnyi töltésű részecske-antirészecske pár, amelynek tagjai  $L$  távolságra eltávolodtak egymástól, majd  $t = \frac{T}{2}$ -kor újra találkoztak és eltűntek. E folyamat amplitúdója  $\exp(-ET)$ -vel arányos az euklideszi metrikájú elméletben, ahol  $E$  a részecske-



1. ábra



2. ábra

antirészecske rendszer energiája. A fenti fázisok elsőbbsikében az energia vezető tagja egy állandó, az utóbbiban a távolsággal lineárisan nő. Ezt a fázist hívják bebörtönző fázisnak, mert az ellentétes töltésű részecskék csak végtelen energia befektetésével szakadhatnak el egymástól.



A Hamilton-formalizmusban is kiszámítható két töltés jelenlétében a tér energiájának megváltozása. A Hamilton-operátor változatlan, ám az (1.21) mellékfeltétel a térerősség és a forgatás operátorainak kapcsolatai alapján módosul.

$$\sum_{i,\pm} L(x, x \pm e_i) |\Psi\rangle = \frac{a^2}{g} Q(x) |\Psi\rangle \quad (1.29)$$

ahol  $Q(x)$  az  $x$  pontban levő töltés nagysága ( $L$  egészértékűsége miatt  $\frac{a^2}{g} Q$  is csak ilyen értékeket vehet fel).

## II. Az erős csatolás határeset

Ha  $g^2 a \rightarrow \infty$  ( $a$  véges), akkor (1.20) második tagja elhanyagolható és a rendszer első közelítésben az

$$a \hat{H}_{\text{erős}} \approx g^2 a \sum_{x,i} L^2(x, x + e_i) \quad (2.1)$$

Hamilton operátorral írható le, hozzávéve az állapottérre vonatkozó (1.21), illetve külső töltések jelenlétékor az (1.29) mellékfeltételt. (2.1) spektrumát  $L^2$  egészértékű sajátértékeivel könnyű megadni, ám a fizikai állapotoknak még a mellékfeltételt is ki kell elégítenie. Ez azt jelenti, hogy külső töltés nélkül olyan állapotok lehetségesek csak, amelyeknek eredő elektromos fluxusa zérus. A legalacsonyabb energiájú állapotok a 3. ábrán láthatók (a vonalak mellé írt szám  $L$  sajátértékét, az elektromos fluxust  $g$  egységekben adja).

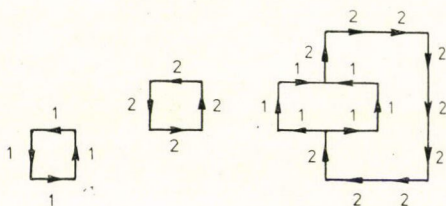
A  $g^2 a \rightarrow \infty$  fázis jellemzésére vizsgáljuk az  $x=0$  és az  $x=R$  pontokba helyezett egységnyi nagyságú ellentétes előjelű töltések energiáját. Ekkor az (1.29) mellékfeltétel az  $L$  sajátértékekre ( $l(x, x + e_i)$ ) a következő

$$\begin{aligned} \sum_{i,\pm} l(x, x + e_i) &= 0, & \text{ha } x \neq 0, R \\ \sum_{i,\pm} l(x, x + e_i) &= 1, & \text{ha } x = 0, \\ \sum_{i,\pm} l(x, x + e_i) &= -1, & \text{ha } x = R. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Nyilván a két töltést összekötő egységnyi fluxust szállító rácsgörbe (2.1)-nek saját-állapotát adja. A legalacsonyabb energiájú a legrövidebb úttal, az egyenessel definiált. Így

$$E_{\text{erős}} = g^2 l \quad (2.3)$$

azaz az erőhatás  $\left(-\frac{dE}{dl}\right)$  állandó. Így a  $g^2 a \rightarrow \infty$  fázisban töltésbörtön van. (1.20) második tagja perturbatíván vehető figyelembe és egy konzisztens kvantumelmélet építhető



3. ábra



ki, amellyel itt nem foglalkozunk [4]. Mindenesetre felhívjuk a figyelmet arra, hogy (2.3) különbözik a kétdimenziós elektrosztatika logaritmikus potenciáljától. Így azt mondhatjuk, hogy környezetünkben jelenleg az elektromágneses tér más fázisban van.

A  $g^2 a \lesssim 1$  szituációt később tárgyaljuk, most azzal foglalkozunk, hogy a  $T=0$  hőmérsékletről elmozdulva, de  $g^2 a \rightarrow \infty$ -t meghagyva módosul-e a helyzet? [7]

A véges hőmérsékletű elektromágneses tér (rácson) a következő állapotösszeggel jellemezhető (külső töltés nélkül):

$$Z_{\text{erős}} = \sum_{\{l_i\}} \exp \left\{ -g^2 \beta \sum_{x,i} l_i^2(x) \right\} \prod_x \delta \left( \sum_i l_i(x) \right). \quad (2.4)$$

A  $\delta$ -függvények Fourier-előállítását használva

$$\begin{aligned} Z_{\text{erős}} &= \sum_{\{l_i\}} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_x \frac{d\alpha(x)}{2\pi} \exp \left\{ -g^2 \beta \sum_{x,i} l_i^2(x) + i \sum_x \alpha(x) \left( \sum_i l_i(x) \right) \right\} = \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\alpha(x)}{2\pi} \sum_{\{l_i\}} \exp \left\{ - \sum_{x,i} [g^2 \beta l_i^2(x) + i l_i(x) (\alpha(x) - \alpha(x + e_i))] \right\}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

A Poisson-újraösszegzési képlettel (2.5)-t a jólismert Villain-modellbe [8] képezhetjük le. Ugyanis

$$\begin{aligned} &\sum_{\{l_i\}} \exp \left\{ -g^2 \beta l_i^2(x) + i l_i(x) (\alpha(x) - \alpha(x + e_i)) \right\} = \\ &= \sum_{\{m_i\}} \int du_i(x) \exp \left\{ -g^2 \beta u_i^2(x) + i u_i(x) (\alpha(x) - \alpha(x + e_i) + 2\pi m_i(x)) \right\} = \\ &= \left( \frac{\pi}{g^2 \beta} \right)^{1/2} \sum_{\{m\}} \exp \left\{ -\frac{1}{4g^2 \beta} (\alpha(x) - \alpha(x + e_i) + 2\pi m_i(x))^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Így

$$Z_{\text{erős}} = \int_{-\pi}^{\pi} \prod_x \frac{d\alpha(x)}{2\pi} \sum_{\{m\}} \exp \left\{ -\frac{1}{4g^2 \beta} (\alpha(x) - \alpha(x + e_i) + 2\pi m_i(x))^2 \right\}. \quad (2.7)$$

A leképezés után az összeg konvergenciája megváltozik, mivel az effektív hőmérséklet az eredeti hőmérséklet reciprokéval arányos. A (2.7)-tel definiált modell korrelációs függvénye a következő viselkedésű aszimptotikus távolságon [8]:

$$\begin{aligned} \langle e^{i\alpha(0)} e^{-i\alpha(r)} \rangle &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{-\mu(r)}, \quad \text{ha } \beta g^2 \gg 1, \\ \langle e^{i\alpha(0)} e^{-i\alpha(r)} \rangle &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} r^{-k}, \quad \text{ha } \beta g^2 \ll 1. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Így az ekvivalens mértékrendszerben is fázisátalakulást várunk.

Vizsgáljuk ezt a Wilson-kritérium Hamiltoni alakján. (2.4)-be az  $x=0$  és  $x=R$  helyeken a (2.2)-t kifejező delta-függvényeket kell helyettesíteni. Nyilvánvaló, hogy két  $\alpha$  — integrálban extra  $\exp(\pm i\alpha)$  jellegű tényező lép fel, így az állapotösszegek elvégzett átalakítások lemásolása után

$$Z(\beta, J(0), J(R)) = Z(\beta) \langle e^{i\alpha(0)} e^{-i\alpha(R)} \rangle. \quad (2.9)$$

Tehát a Wilson-kritérium a korrelációs függvénybe képződik le.

A rendszer alapállapotának források jelenlétében számolt szabad energiájából a forrásmentes esetét levonva kapjuk a töltések kölcsönhatási energiáját

$$E_{\text{int}} = \frac{1}{\beta} [-\ln Z(\beta, J(0), J(R)) + \ln Z(\beta)] = -\frac{1}{\beta} \ln \langle e^{i\alpha(0)} e^{-i\alpha(R)} \rangle \quad (2.10)$$

amire (2.8) felhasználásával

$$\begin{aligned} E_{\text{int}} &= \mu|R|, & \text{ha } \beta g^2 \gg 1 \\ E_{\text{int}} &= k \ln|R|, & \text{ha } \beta g^2 \ll 1. \end{aligned} \quad (2.11)$$

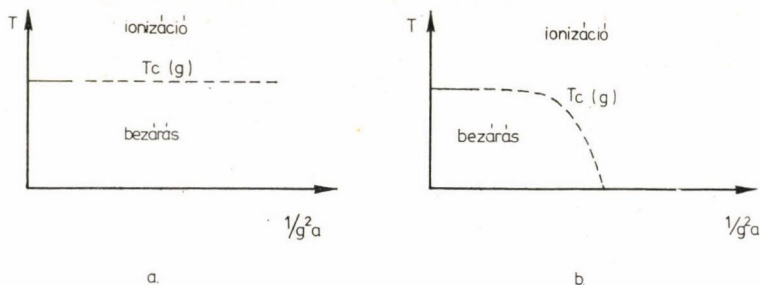
Tehát alacsony hőmérsékleten (bezáró erő hat), magas hőmérsékleten a kétdimenziós  $1/R$ -es erőtvénnyé alakul ki.

Kérdés, mi a helyzet a gyenge csatolás tartományában?

### III. A gyenge csatolási határeset

A  $g^2 a \ll 1$  határesetet rácson általában nehezebb vizsgálni, mint az elméletek eredeti, folytonos megfogalmazásában. A Hamiltoni eljárásban erre eddig nem is történt kísérlet. Az (1.10) állapotösszeg célszerű transzformációit vizsgálta A. M. Poljakov [9], T. Banks, J. Kogut, R. Myerson [10]. Arra a következtetésre jutottak, hogy a bebörtönző fázis  $T=0$ -n esetleg fennmaradhat a teljes  $g^2 a$ -tengely mentén. Ez esetben a fázisdiagramm a 4a ábrán láthatóhoz lenne hasonló a hőmérséklet-csatolási állandó síkban.

B. E. Baaquie [11] párhuzamos vizsgálataiban (1.10)-nél egyszerűbb, de rögzített rácsállandóra azzal egyező univerzalitási osztályba tartozó modellen végezte el.



4. ábra

Mi több, a két modell a formális  $a \rightarrow 0$  határátmenetben ugyanúgy a klasszikus elektrodinamikai hatást adta vissza. Baaquie eredménye arra utal, hogy már  $T=0$ -n valamely véges  $g^2 a$  értéknél fázisátalakulás történik, ami a 4b ábrán látható kvalitatív fázisdiagrammot eredményezi. A kérdés még nem tekinthető lezártnak. A lényegében hasonló módszerű vizsgálatokat Baaquie cikkének ismertetésével mutatjuk be.

Előzetesen megjegyezzük, hogy az (1.10) állapotösszeg praktikus haszna a folytonos elmélettel szemben az, hogy  $\varphi(x, x + e_i)$  szögváltozóként szerepel benne, amely a véges térfogatú  $(-\pi, \pi)$  tartományban változik (kompakt elektrodinamika). Az  $e$  tar-



tományon kívüli értékek figyelembevétele felesleges többszörszámolást eredményezne a koszinusz-függvény periodikussága miatt.

A periodikusság és vele a kompaktság más Hamilton-függvény választásával is elérhető. Defináljuk a Boltzmann-tényezőt a következőképpen:

$$\exp(-\mathcal{H}) = \sum_{l_i(x)=-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{1}{2g^2a} \left(\frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \Gamma_{jk}(x) - 2\pi l_i(x)\right)^2\right\} \quad (3.1)$$

(3.1)-ben a  $\varphi(x, x+e_i)$  változókbeli periodikusság úgy biztosított, hogy a megfelelő  $l_i(x)$  változó értékét változtatjuk. Ugyanis ha  $\varphi(x, x+e_i) = q \cdot 2\pi + \tilde{\varphi}_i(x)$ ,  $l_i(x) = 0$  ( $-\pi \leq \tilde{\varphi} \leq \pi$ ), akkor ez a szituáció nem különböztethető meg a  $\varphi_i(x) = \tilde{\varphi}_i(x)$ ,  $l_i(x) = -q$  konfigurációtól. Ezért a többször-számolás elkerülése végett elegendő a  $(-\pi, \pi)$  intervallumban változtatni  $\varphi(x, x+e_i)$ -t:

$$Z = \int_{-\pi}^{\pi} \left( \prod_{x,i} \frac{d\varphi(x, x+e_i)}{2\pi} \right) \exp(-\mathcal{H}). \quad (3.2)$$

A tájékozott olvasó azonnal felismeri, hogy (3.2) és (1.10) kapcsolata azonos a planáris modell és a megfelelő Villain-modell kapcsolatával. Ezen túlmenően az  $a \rightarrow 0$  határesetben a (3.1)-beli  $\mathcal{H}$  ugyanúgy a klasszikus elektrodinamikai hatáshoz tart, mint az előző fejezetben tárgyalt modell.

A Wilson-kritérium későbbi kiszámításához szükségünk van a külső források jelenlétében érvényes állapotösszegre. A  $j_i(x)$  egészértékű forrásokat mértékinvariánisan csatoljuk  $\varphi(x, x+l_i)$ -hez:

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = i\varepsilon_{ijk} \sum_x j_i(x) \delta_j \varphi(x+e_j, x+e_j+e_k) \quad (3.3)$$

ahol

$$\delta_j \varphi_k(x+e_j) = \varphi_k(x+e_j) - \varphi_k(x), \quad \varphi_k(x) \equiv \varphi(x, x+e_k).$$

Parciális összegzéssel, feltéve, hogy a források véges tartományban helyezkednek el, a

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = -i\varepsilon_{ijk} \sum_x \delta_j j_i(x) \varphi_k(x) \quad (3.4)$$

alakra jutunk.

A számításához célszerű (3.1)-n is átalakítást végezni. A Poisson újraösszegzési képletet alkalmazva minden egy  $l_i(x)$  szerinti összegzésre:

$$\begin{aligned} & \prod_{x,i} \sum_{l_i(x)} \exp\left\{-\frac{1}{2g^2a} \left(\frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \Gamma_{jk} - 2\pi l_i(x)\right)^2\right\} = \\ & = \prod_{x,i} \sum_{p_i(x)} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta_i \exp\left\{2\pi i p_i \zeta_i - \frac{1}{2g^2a} \left(\frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \Gamma_{jk} - 2\pi \zeta_i(x)\right)^2\right\} = \\ & = \text{állandó} \prod_{x,i} \sum_{p_i(x)} \exp\left\{-\frac{g^2a}{2} p_i^2 + \frac{1}{4} \varepsilon_{ijk} \Gamma_{jk} p_i(x)\right\}. \end{aligned} \quad (3.5)$$



Az exponens második tagjában parciális összegzést végezve valamint figyelembe véve, hogy  $\Gamma_{jk}(x) = \delta_j \varphi_k(x) - \delta_k \varphi_j(x)$  és elhagyva a lényegtelen állandót, azt kapjuk, hogy

$$\prod_{x,i} \sum_{p_i(x)} \exp \left\{ -\frac{g^2 a}{2} p_i^2(x) - \frac{1}{2} i \varepsilon_{ijk} \sum_x \varphi_k(x) \delta_j p_i(x) \right\}. \quad (3.6)$$

(3.6) és (3.4) kombinálásával a külső források jelenlétében érvényes állapotösszeg a következő:

$$Z[j] = \sum_{\{p_i\}} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{x,i} \left[ \frac{d\varphi_i(x)}{2\pi} \exp \left\{ -\frac{g^2 a}{2} p_i^2(x) + \frac{i}{2} \varepsilon_{ijk} \varphi_k(x) \delta_j (p_i - j_i) \right\} \right] \quad (3.7)$$

(3.7)-ben a  $\varphi$ -integrálás egyszerűen elvégezhető:

$$Z[j] = \sum_{\{p_i\}} \prod_{x,i} \left[ \exp \left( -\frac{g^2 a}{2} p_i^2(x) \right) \delta_{\varepsilon_{ijk} \delta_j (p_k - j_k), 0} \right] \quad (3.8a)$$

avagy a  $p_i - j_i \rightarrow \varphi_i(x)$  változócserevel

$$Z[j] = \sum_{\{p_i\}} \prod_{x,i} \left[ \exp \left\{ -\frac{g^2 a}{2} (p_i(x) + j_i(x))^2 \right\} \delta_{\varepsilon_{ijk} \delta_j p_k, 0} \right]. \quad (3.8b)$$

A Kronecker-delta  $\varepsilon_{ijk} \delta_j p_k = 0$ -t követel minden egyes rácspontra. Minthogy ez a mennyiség a rotáció folytonos műveletének megfelelője, az analógia alapján nyilvánvaló, hogy a

$$p_k(x) = \delta_k p(x) \quad (3.9)$$

választás elégíti ki a mellékfeltételt. Így

$$Z[j] = \sum_{p(x)} \prod_{x,i} \exp \left\{ -\frac{g^2 a}{2} (\delta_i p(x) + j_i(x))^2 \right\}. \quad (3.10)$$

Miért alkalmas (3.10) a gyenge csatolási határeset leírására? Erre egy heurisztikus érvet adunk. Ha  $p(x)$  egységnyit változik az exponens változása kicsiny, mivel  $g^2 a/2 \ll 1$ . Így kínálkozik a  $p(x)$ -re vonatkozó összegzés közelítő helyettesítése a  $du = \left( \frac{1}{2} g^2 a \right)^{1/2} dp$  szerinti integrállal. Ekkor (3.10)-ből a harmonikus közelítésből nyerhető kifejezéssel azonos mennyiségre jutunk, amiről jól tudott, hogy  $g^2 a \rightarrow 0$ -ra egzakt. Ezzel a közelítéssel azonban a harmonikus közelítés korrekcióit elveszítjük. (3.10)-re a Poisson újraösszegzést megint alkalmazva, mód nyílik a korrekciók megtartására is.

$$Z[j] = \sum_{\{q\}} \int_x \left( \prod_x d\xi(x) \right) \prod_{x,i} \exp \left\{ 2\pi i q(x) \xi(x) - \frac{g^2 a}{2} (\delta_i \xi(x) + j_i(x))^2 \right\}. \quad (3.11)$$



Az integrálok elvégzéséhez az exponenst diagonalizálni kell. Ezt legegyszerűbb a Fourier-transzformáltak terében kidolgozni. Bevezetve a

$$\begin{aligned}\zeta(x) &= \sum_k e^{ikx} y(k) \\ v_{ki} &= 1 - e^{-ik_i}, \quad d_k = \sum_i |v_{ki}|^2 \\ D(x) &= \sum_k e^{ikx} / d_k\end{aligned}$$

mennyiségeket, egy nem túl érdekes számolás után a

$$Z[j] = \exp(F_c) \cdot \tilde{Z}[j] \quad (3.12)$$

faktorizált alakra jutunk, ahol

$$F_c = \frac{g^2 a}{2} \sum_{x,i} j_i(x)^2 + \frac{g^2 a}{2} \sum_{x,x'} \delta_i j_i(x + e_i) D(x - x') \delta_k j_k(x' + e_k) \quad (3.13)$$

és

$$\begin{aligned}\tilde{Z}[j] &= \sum_{\{q\}} \exp \left\{ -\frac{2\pi^2}{g^2 a} \sum_{x,x'} q(x) D(x - x') q(x') + \right. \\ &\quad \left. + 2\pi i \sum_{x,x'} q(x) D(x - x') \delta_i j_i(x + e_i) \right\}.\end{aligned} \quad (3.14)$$

(3.19) a források távolhatás formájú kölcsönhatását írja le. A tér kvantumingadozásai közti, illetve a fluktuációk és a források közti kölcsönhatást (3.14) adja meg.\* Remélhető, hogy a  $q(x)=0$  konfiguráció adja a legnagyobb járulékot  $Z[j]$ -hez, azaz  $\tilde{Z}[j] \approx 1$ .

A Wilson-kritérium két töltött forrás kölcsönhatási energiájának kiszámítását jelenti aszimptotikusan nagy távolságokon. A fluktuációk elhanyagolásával a kör-integrál várható értékét úgy számítjuk ki, hogy egy helyettesítő árameloszlást találunk ki és képezzük  $\exp(F_c(j))$ -t:

$$\langle \exp(i \sum_c \varphi_i(x)) \rangle = \exp F_c(j). \quad (3.15)$$

A bal oldali várható érték definícióján a (3.2)-ből (3.7)-hez vezető lépéseket végezzük el, de a (3.7)-beli exponens második tagja helyett

$$i\varphi_k(x) \left( \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \delta_j p_i(x) + \delta_{c,xk} \right)$$

áll, ahol  $\delta_{c,xk}$  a kontúrt alkotó élekre 1, másutt zérus. A  $\varphi_k$  szerinti integrálás után (3.8a)-t kapjuk, a módosult

$$\frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \delta_j p_i + \delta_{c,xk} = 0$$

\* A kvantált töltések  $\left( \frac{2\pi}{g} q \right)$  közti kölcsönhatás interpretációjáról lásd a [9, 10, 12] cikkeket.

mellékfeltételekkel. Ezekben  $\delta_{c,xk}$  reprezentálására kell egy azonos  $\frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \delta_{j p_i}$ -re vezető  $j_i$  árameloszlást találni. Ha a kontúr az  $(1, 2)$  síkbeli  $L$  oldalú négyzet, akkor  $k=1, 2$  értékre különbözik  $\delta_{c,xk}$  nullától. Egy lehetséges megoldási lehetőség az, hogy a  $\delta_{j_i}$  különbséget ugyanebben a síkban képzett különbségek esetén választjuk nullától különbözőnek a kontúron való áthaladáskor ( $j=1, 2$ ). Így az  $i$  index számára csak  $i=3$  lehetséges. Minthogy a különbség értéke egységnyi, az ekvivalens áramsűrűség a négyzet belsejében homogén és egységnyi:

$$j_i(x) = \delta_{i3} \sum_{l_1, l_2}^L \delta_{x, l_1 e_1 + l_2 e_2} \quad (3.16)$$

(3.15) kiszámításához (3.16)-ot helyettesítjük (3.13)-ba. Eredményül az  $N \cdot M \rightarrow \infty$  limeszben

$$F_c[j] = -\frac{g^2 a}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{|r_{q1}|^2 + |r_{q2}|^2}{d_q} \right\} |j_q|^2 \quad (3.17)$$

adódik, ahol  $j_q$  (3.16) Fourier-transzformáltja. Az  $L \gg 1$  esetben

$$F_c[j] = -\frac{g^2}{\pi} L \ln L + O(L) \quad (3.18)$$

adódik, ami a Wilson-féle rendparaméternek az I. fejezet végén adott értelmezése szerint két ellentétes előjelű távolságú töltés kölcsönhatási energiáját adja meg

$$E_{\text{int}} = \frac{g^2}{\pi} \ln L \quad (3.19)$$

ami a szokásos kétdimenziós Coulomb-törvény.

Kérdés, vajon véges  $g^2 a$ -ra vagy  $g^2 a=0$ -ra következik-e be a fázisátalakulás? Ennek vizsgálatára Banks, Kogut és Myerson [10] figyelembe vették (3.12)-ben (3.14)-et is  $q = \pm 1$  értékre korlátozódva. E feltevessel (3.14) maximalizálását a (3.16) áram mellett a  $q(x)$ -eloszlás kiszámítására használták. Ezt a megoldást visszatéve (3.14)-be,  $L$ -ben kvadratikusan exponenst is kapunk. Azonban a potenciál együtthatója  $\sim \exp(-\pi^2/g^2 a)$ , ami nem-analitikusan, de probléma nélkül tűnik el a gyenge csatolási limeszben. Ez az eredmény arra utal, hogy  $g^2 a=0$  pont lesz a fázisátalakulás pontja.

Baauquie [11] az átlagtér-elmélet segítségével próbálta a fenti sejtést vizsgálni. E közelítésben

$$\frac{1}{V} \overline{Z} = \sum_p \exp \left\{ -\frac{g^2 a}{2} (p-M)^2 \right\}$$

ahol  $M$  fejezi ki a szomszédok hatását. A közelítés ellentmondás-mentességét  $\langle p \rangle$  révén ellenőrizhetjük:

$$M = \sum_p p \exp \left\{ -\frac{g^2 a}{2} (p-M)^2 \right\} \quad (3.20)$$



minden  $M \in (0,1)$  értékre. Ennek  $g^2 a \neq 0$ -ra  $M=1/2$  a megoldása, míg  $g^2 a \rightarrow 0$ -ra  $0(\exp(-1/g^2 a))$  pontossággal tetszőleges  $M$ -re teljesül. Így az átlagtérelmélet is  $g^2 a = 0$  átalakulási hőmérsékletet sugall, azaz a bezáró fázis  $T=0$ -n gyakorlatilag a teljes  $g^2 a$ -tengelyen jelen van.\*

\*A kézirat elkészülte után jelent meg *S. Drell, H. R. Quinn, B. Svetitsky és M. Weinstein* cikke [SLAC—PUB—2122 (1978 június)], amely Hamilton formalizmusban vizsgálja a gyenge csatolási határesetet. A kompakt elektrodinamikában,  $2+1$  dimenzióban a fent bemutatottal azonos eredményre jutnak.

#### IRODALOM

1. *K. G. Wilson*, Phys. Rev. *D10*, 2445, 1974.
2. *D. E. Dzhaloghinsky, G. E. Volovik* J. de Physique, 1978.
3. pl. *C. Itzykson, I. Iliopoulos, A. Martin*, Rev. Mod. Phys. *47* 175, 1975.  
*L. P. Kadanoff*, Rev. Mod. Phys. *49*, 267, 1977.
4. *J. Kogut, L. Susskind*, Phys. Rev. *D11*, 395, 1975.  
*E. Fradkin, L., Susskind*, Phys. Rev. *D17*, 2637, 1978.
5. *H. E. Stanley*, Phys. Rev. *179*, 570, 1969.
6. *S. Elitzur*, Phys. Rev. *D12*, 3978, 1975.
7. *A. M. Poljakov*, Phys. Letters *72B*, 477, 1978.  
*L. Susskind*, SLAC—PUB—2070, 1978. január
8. *J. Villain*, J. de Physique *36*, 581, 1975.
9. *A. M. Poljakov*, Nucl. Phys. *B120*, 429, 1977.
10. *T. Banks, J. Kogut, R. Myerson*, Nucl. Phys. *B124*, 499, 1977.
11. *B. E. Baaquie*, SLAC—PUB 1989, 1977. augusztus
12. *B. Savit*, Phys. Rev. Letters *55*, 1977.  
Phys. Rev. *B17*, 1340, 1978.





# KÖNYVISMERTETÉS

L. Garrido, P. Seglar, P. J. Shepherd (szerk.): *Stochastic Processes in Nonequilibrium Systems. Proceedings, Sitges 1978.*

Springer Lecture Notes in Physics Vol. 84.

A matematikus számára érdekes s egyben megtermékenyítő hatású olvasmány az előadás-gyűjtemény. Az előadások a Fifth Sitges International School of Statistical Mechanics (1978. június 11—23.) keretében hangzottak el. A 8 nagyelőadást és a 20 kiselőadást fizikusok, vegyészek tartották. A téma: nem-egyensúlyi rendszerek sztochasztikus vizsgálata. Az alkalmazott módszerek között vannak nem-egzaktak és egzaktak egyaránt. Az elméleti fizika általában nem-egzakt módszereket használ, és pont ez sikereinek egyik titka: nem terheli a matematika mindent bizonyító nehézsége. Ugyanakkor a fizikailag helyes elmélet egzakt tárgyalása az elmélet elmélyüléséhez, fogalmi egyszerűsödéséhez vezet, sőt bizonyos ellentmondások és tudományos viták eldöntése is lehetetlen az egzakt, axiomatikus felépítés nélkül (kitűnő példa a kvantummező-elmélet, amellyel kapcsolatban épp a mondottakat illusztrálja A. S. Wightman cikke a *Physics Today* 1969. szeptemberi számában). Sőt az egzakt módszerek azután a fizika más területein is alkalmazhatóak, az egzakt elmélet a nem egzakt módszerek számára is biztosabb és erősebb intuitív és technikai alap. Mindezt azért volt itt érdemes elmondani, mert ez magyarázza a kezdő mondatot. Az egzakt statisztikus fizika az utóbbi 10—15 évben önálló tudományággá fejlődött, és az egyensúlyi állapotok leírása mellett mostanában jut egyre nagyobb szerep a nem egyensúlyi rendszerek vizsgálatának. Ezért különösen érdekes e kötet, amely számos olyan nem-egzakt eredményt is tárgyal, amely egyébként nem-egzakt voltában is új és figyelemreméltó, és amelynél ma már megvan a remény az egzakt elmélet felépítésére is. Az érintett témákról a legfontosabb információ a nagyelőadások tartalomjegyzékének megadása: N. G. van Kampen: *An Introduction to Stochastic Processes for Physicists*; E. Santos: *Stochastic Differential Equations with Non-Markov Processes*; R. M. Mazo: *Aspects of the Theory of Brownian Motion*; R. Graham: *Path-Integral Methods in Nonequilibrium Thermodynamics and Statistics*; H. Haken: *Synergetics-Field Beyond Irreversible Thermodynamics*; B. J. Alder: *Computer Results on Transport Properties*; O. Penrose: *Kinetics of Phase Transitions*; Y. Pomeau: *Stochastic Behaviour of Simple Dynamical Systems*. A kötetben magyar szerzőkre is vannak hivatkozások.

Szász Domokos

A. H. Zewail (szerk.): *Advances in Laser Chemistry*  
Springer Series in Chemical Physics 3.

Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York 1978.

A sorozat többi tagjához hasonlóan a lézerkémiai foglalkozó most megjelent kötetben szereplő témák érdekessége, valamint a kutatások eszköztára és módszertana hasznos segédesszök lehet a modern kémiai kutatásokban.

A könyv az 1978. március 20—22 között USA Pasadena, California Institute of Technology-ban megrendezett azonos című konferencia anyagát adja közre. Az anyag többségében neves amerikai kutatóintézetek munkatársaitól, illetve néhány japán és nyugatnémet szerzőtől származik. A konferencián elhangzott előadások egy része teljes terjedelmében, a többi rövid összefoglalóban szerepel, minden esetben bőséges és jól áttekinthető irodalomjegyzék segíti a további részletes tájékoztatást.

A fejezetek a lézer-kémia öt fontos területének újabb irányzatait és eredményeit tekintik át 46. cikkben. Fejezetenként néhány szemelvény:

1. *Lézer indukált kémia.* A szerzők tárgyalják az izolált molekulákban lejárló belső energia-transzfer kinetikáját, erre vonatkozóan a statisztikus-fizikai leírás érvényességi határait, s a folyamat elemzésére új kvantummechanikai modelleket ismertetnek. (S. A. Rice)



A festék-lézer indukált fotokémia lehetőséget nyújt a magasfokon túltett elektron és vibrációs átmenetek tanulmányozására, a fotoaktív kémiai reagensek közvetlen egyfotonos gerjesztésére és a felharmonikusok révén a sokatomos molekulák magasan gerjesztett állapotainak előállítására. Erre vonatkozó cikket közöl K. V. Reddy, R. G. Bray és M. Y. Berry.

2. *Pikoszekundumos folyamatok és technikák.* Részletes előadásanyag található a „közepes méretű rendszerek vibrációs és elektronikus relaxációja” címmel (R. M. Hochstrasser) melyben a szerző a kondenzált fázisban levő közepes méretű molekulákban fellépő belső energiamegoszlást vizsgálja koherens és Raman szórás segítségével és tranziens spektroszkópiai módszerekkel.

P. M. Rentzepis és munkatársai a „Bakteriális fotoszintézis néhány ultragyors folyamatának pikoszekundumos tanulmányozása” címmel a biofizikai, biokémiai kutatások egyik igen népszerű területén nyújtanak új eredményeket és módszereket ismertető cikket.

A pikoszekundumos lézerspektroszkópia segítségével bonyolult rendszerek rövid élettartamú állapotai válnak megismerhetővé. Erre vonatkozó tanulmányok olvashatók a fejezetben lézer festékanyagok, fontos biológiai molekulák példáin.

### 3. *Nemlineáris optikai spektroszkópia és fázisvesztési folyamatok.*

A nemrég kifejlesztett koherens anti-Stokes Raman rezonancia spektroszkópia jó módszernek kínálkozik az erősen fluoreszkáló molekulák tanulmányozására (L. A. Carreira, L. P. Goss), és a különböző gázfázisú anyagok foto-tulajdonságainak vizsgálatára (S. Lewont, A. B. Harvey).

Hosszabb áttekintést olvashatunk a kondenzált fázisokban létrejövő optikai fázisvesztés elméletéből K. E. Jones és A. H. Zewail szerzőktől.

### 4. *Többfotonos molekulagerjesztés.*

A lézer-technika nyújtotta nagy fényintenzitások lehetővé teszik az anyagban létrejövő két és többfotonos abszorpciók révén a molekulák magasan gerjesztett és ionizációs állapotai szimmetria és egyéb fontos paramétereinek megismerését. Sokatomos rendszereken végezték kutatásaikat D. H. Parker és munkatársai.

A különböző hullámhossztartományokban végzett két- és többfotonos abszorpciós vizsgálatok mellett a fejezetben a molekulán belüli energiamegoszlás elméleti kvantummechanikai számításait találjuk kvázi-periodikus, ill. ergodikus tartományokban. (R. A. Marcus és munkatársai)

### 5. *Molekuláris dinamika vizsgálata molekuláris nyalábokon.*

R. B. Bernstein „Reakciódinamika molekuláris nyalábokon” a fejezet bevezető cikke, melyben a szerző ismerteti az elemi kémiai reakciók molekuláris dinamikájának részletes megismerését lehetővé tevő új módszert a keresztezett molekulanyaláb-szórást, ismertette annak elméleti és technikai lehetőségeit és feltételeit.

„A van der Waals molekulák struktúrája és dinamikája” címmel W. Klemperer cikke a van der Waals kötés és a szorosabb kémiai kötések közti hasonlóságot vizsgálja a molekula vagy komplex struktúrája, a kötések gerjeszthetősége és a töltéselosztás szempontjából a molekulanyaláb módszerrel, különös tekintettel a lézer-technikában fontos vegyületek viselkedésére.

Az ismertetésre önkényesen kiválasztott cikkeken kívül még számos fontos, a hazai kutatók érdeklődésére is számot tartó téma szerepel a szerkesztők és a kiadó által példás gyorsasággal publikált könyvben.

(T.K.)

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Marton Andor

A kézirat beérkezett: 1978. IX. 27. — Terjedelem: 8,75 (A/5) ív

79-214 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József igazgató

MAGYAR  
AKADÉMIAI KIADÓ  
KÖNYVTÁRA





## TARTALOMJEGYZÉK

Kollár János: Átmeneti és nemesfémek kohéziós és rugalmas tulajdonságai .....	209
Patkós András: A kvantumelektrodinamika globális jellemzése téridő rácson .....	289

## KÖNYVISMERTETÉS

L. Garrido, F. Segler, P. J. Shepherd: Stochastic Processes in Nonequilibrium Systems .....	307
A. H. Zewail: Advances in Laser Chemistry .....	307



307.226

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

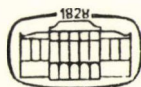
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR  
ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
PÁL LÉNÁRD

XXVII. KÖTET

4. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1979

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10-10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 év terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetemi tanár

Biofizikai Intézet

1444 Budapest VIII. Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 72 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# A NEMATIKUS FOLYADÉKKRISTÁLYOK MIKRODINAMIKÁJÁNAK VIZSGÁLATA\*

KUGLER SÁNDOR

BME, Fizikai Intézet

## Rövid összefoglaló

Jelen dolgozatban a nematikus folyadékkristályok mikrodinamikáját vizsgáltuk. Eddigi eredményeket figyelembe véve modelleket választottunk. Neutronszórást feltételezve számítógéppel számoltuk a kétszer differenciális szórási hatáskeresztmetszetet. Ezt a modellekben szereplő paraméterek változtatásával illesztettük a termikus neutronok inkohereus kvázirugalmas szórásával mért pontokra. A görbék illeszkedéséből következtettünk a molekulák egyedi mozgására.

Ezen kívül kvantumkémiai közelítő módszerek segítségével a folyadékkristály molekulák rotációs barrierjeit határoztuk meg.

Saját munka egy modell (V. 4.) kidolgozása, a számítógépes modellezés és a kvantumkémiai közelítő számítások elvégzése.

## TARTALOMJEGYZÉK

Rövid összefoglaló .....	309
Tartalomjegyzék .....	309
I. Fejezet. A folyadékkristályok .....	310
1. Folyadékkristályok .....	310
2. A folyadékkristályok csoportosítása .....	311
a) Termotróp folyadékkristályok .....	311
Szmeztikus állapot .....	311
Nematikus állapot .....	311
Koleszterikus állapot .....	312
b) Liotróp folyadékkristályok .....	312
3. A nematikus fázis .....	312
4. Maier—Saupe-elmélet .....	313
II. Fejezet. Neutronfizikai ismeretek .....	313
1. Elméleti áttekintés .....	313
2. Neutronfizikai lehetőségek .....	316
III. Fejezet. A mérőberendezés leírása .....	317
1. A korrelációs mérési technika alapjai .....	317
2. A mérőberendezés leírása .....	318
a) Polikristályos Be szűrő .....	318
b) Orientált grafit monokromátor .....	319
c) Stohasztikus szaggató .....	319
d) Fűthető mintatartó .....	320
e) Árnyékolt repülési út .....	320
f) Detektorok .....	320
g) 4 K tároló .....	321

\* Egyetemi doktori értekezés. 1977. Érkezett 1978. V. 12.

IV. Fejezet. Kvantumkémiai közelítő számítások .....	321
1. PCILO és CNDO/2 kvantumkémiai közelítő módszer .....	321
2. PAA molekulára végzett számításaink .....	321
a) Metil-, metoxycsoport forgása .....	322
b) Belső forgások .....	323
3. DB—PBB molekulára végzett számításaink .....	324
a) —CH <sub>3</sub> csoport forgása .....	324
b) —CH <sub>2</sub> —CH <sub>3</sub> csoport forgása .....	325
c) —CH <sub>2</sub> —CH <sub>2</sub> —CH <sub>3</sub> csoport forgása .....	325
d) —CH <sub>2</sub> —CH <sub>2</sub> —CH <sub>2</sub> —CH <sub>3</sub> csoport forgása .....	326
V. Fejezet. Diffúziós modellek .....	327
1. Anizotrop translációs diffúziós modell .....	327
2. Folytonos szférikus rotációs modell .....	328
3. Egytengelyű rotátor rotációs diffúziója stohasztikus bolyongás alapján .....	329
4. Reflektálófalas egytengelyű rotátor .....	331
5. Bolyongás gömbfelületen .....	332
VI. Fejezet. Méréskiértékelés .....	333
1. A PAA molekulára végzett mérések kiértékelése .....	333
2. A DB—PBB molekulára végzett mérések kiértékelése .....	337
Köszönetnyilvánítás .....	340
Irodalomjegyzék .....	340

## I. FEJEZET

### 1. Folyadékkristályok

Amikor bizonyos kristályos anyagokat — melyek általában szerves molekulák-ból épülnek fel — melegítünk, nem mennek át egyenesen folyadék fázisba, hanem fel-vesznek egy olyan szerkezetet, mely rendezettsége és tulajdonságai alapján egy köz-benső állapota a valódi kristálynak és az izotrop folyadéknak. Ezek a kristályos anya-gok ebből a közbenső állapotból mennek át izotrop folyadék állapotba. A folyamat reverzibilis és fázisátalakulással jár együtt.

Az első ilyen tulajdonságokkal rendelkező anyagot *Reinitzer* osztrák botanikus találta meg 1888-ban [1]. Ez koleszteril benzoát volt, mely 145 °C és 179 °C között mutatta ezt az állapotot. Manapság több ezer ilyen tulajdonságokkal rendelkező anyagot ismerünk.

Ennek a közbenső állapotnak több nevet adtak (mezomorf, mezoform, para-kristály), de végül a folyadékkristály név vált használatossá.

Az ötvenes évek óta nagy érdeklődés mutatkozik a folyadékkristályok iránt. En-nek oka az, hogy fizikai tulajdonságaik nagy lehetőségeket nyújtanak a gyakorlati alkalmazásra. Néhány példa:

Két elektróda közé helyezünk folyadékkristályt és kapcsoljunk rá egyenteret. Az eddig átlátszó anyag tejfehérré válik. Ezt az ún. dinamikus szórásat felhasználják display-ek, TV képcsövek gyártására. Nagy előnyük, hogy igen kis teljesítménnyel működtethetők.

Más folyadékkristályok esetében, ha a két elektrodára kis frekvenciás váltó-jelet adunk, a közte levő anyag fehér színűvé válik. A teret kikapcsolva megtartja a fe-hér színét. Ezt a jelenséget optikai tárolók készítésére lehet felhasználni.

Bizonyos anyagok hőmérsékletük változásával változtatják a színüket. Ezt a je-lenséget színhatás alapján működő hőmérsékletmérésre lehet felhasználni.



Vannak olyan anyagok, melyek egy meghatározott irányban csak egy színű fényt vernek vissza. Az anyagot elektromos térbe helyezve, a térerősség változtatásával ez a szín is változik. Ezt a jelenséget hangolható diffrakciónak nevezik. Színes kijelzők készíthetők ezekkel az anyagokkal.

## 2. A folyadékkristályok csoportosítása

A folyadékkristályokat két alapvető osztályba sorolhatjuk be: termotróp és liotróp folyadékkristályok.

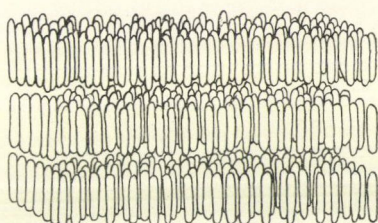
### a) Termotróp folyadékkristályok:

Az elnevezés onnan származik, hogy a hőmérsékletváltozás hatására jön létre a folyadékkristályos állapot. Alapvetően három csoportba sorolhatjuk ezeket az anyanyagokat: szmektikus, nematikus és koleszterikus folyadékkristályok.

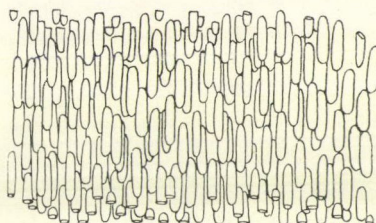
#### *Szme'tikus állapot*

Ebben az állapotban a pálca alakú molekulák hosszanti tengelyükkel párhuzamosan állnak és a molekulák tömegközéppontja egy-egy, egymástól azonos távolságban levő síkokban helyezkedik el.

Köztük irányrendezettség és translációs szimmetria van. A rétegek között nagyon gyenge a kölcsönhatás, így könnyen elcsúsznak egymáson. A síkokon a tömegközéppontok rendezett vagy rendezetlen eloszlásúak lehetnek. Ezek alapján a szmektikus állapotot fel lehet osztani alfázisokra, mint szmektikus A, B, C, H stb.



1. ábra. A molekulák elhelyezkedése szmektikus anyagban



2. ábra. A molekulák elhelyezkedése nematikus anyagban

#### *Nematikus állapot*

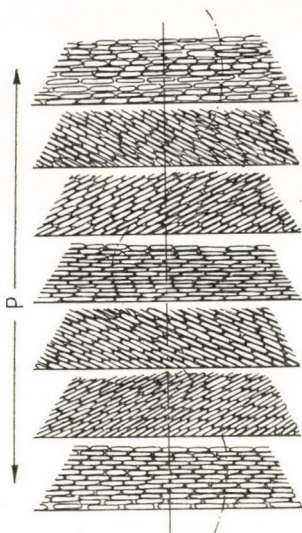
Ez kevésbé rendezett állapot, mint az előző. Ebben az állapotban a molekulák hosszitengelye egymással közelítőleg párhuzamosan helyezkedik el, de a molekulák tömegközéppontja véletlenszerűen rendeződött. Így csak irányrendezettség van.

Jellegzetes tulajdonsága az ún. fonalas képződmény. Ez a homogén részek határvonala. A kitüntetett irány ezeken a helyeken megváltozik. Ezt diszinklinációnak nevezik, a kristályokban megfigyelhető diszlokációkhoz hasonló módon.

Diszinklinációtól mentes anyagot a tartólemezek speciális megmunkálásával, elektromos vagy mágneses tér segítségével lehet előállítani.

### Koleszterikus állapot

A molekulák síkokban vannak. Egy-egy síkon belül a molekulák hossz tengelye párhuzamos. Ezek a rétegek egymás felett, egymástól egy bizonyos szöggel elfordulva helyezkednek el. Az elfordulás mértékét egy spirál egyenletével lehet leírni. A síkban elhelyezkedő molekulatörzsből kiemelkedik egy gyök és ez okozza a következő réteg elfordulását.



3. ábra. A molekulák elhelyezkedése koleszterikus anyagban

Sok termotróp anyag a szilárd és folyadék fázis között nemcsak egy, hanem a hőmérséklettől függően többfajta folyadékkristályos szerkezetet mutat. Ezeket az anyagokat polimorfoknak nevezzük. A rendezetlenebb szerkezetek mindig alacsonyabb hőmérsékletnél mutatkoznak. Ilyen anyag pl. a TBBA (tereftal-bisbutylanilin), amely a szilárd — szmektikus B — szmektikus C — szmektikus A — nematikus — izotrop folyadék fázisokat veszi fel.

#### b) Liotróp folyadékkristályok:

Ez az állapot úgy jön létre, hogy nagy rúd alakú molekulák oldószerben megfelelő koncentráció esetén az előbbi folyadékkristályokhoz hasonló sajátosságokat mutatnak.

Ilyen anyagok pl. dohány mozaik vírus, néhány polipeptid, szappanok vizes oldata.

### 3. A nematikus fázis

Jelen dolgozatban a nematikus folyadékkristályokkal foglalkozunk. Ezek nem rendezettek olyan magas fokon mint a szmektikusok.

A hengerszimmetrikusnak tekinthető molekulák hossz tengelyei közel párhuzamosan helyezkednek el ebben a fázisban. Így könnyen tudunk definiálni egy hosszútávú rendparamétert:

$$S = \frac{1}{2} \langle 3 \cos^2 \theta - 1 \rangle = \langle P_2(\cos \theta) \rangle$$

$\theta$  a molekula tengelye és a kitüntetett irány közötti szöget,  $\langle \rangle$  jel pedig a termodinamikai átlagot jelenti.  $P_2(x)$  Legendre polinom. Ha párhuzamosak a tengelyek — általában ez a helyzet a kristályokban —  $S=1$ , ha tökéletesen rendezetlen, vagyis a molekulatengelyek véletlenszerűen helyezkednek el — izotrop folyadék állapot — akkor  $S=0$ . A rendparaméter nematikus fázisban erősen hőmérsékletfüggő, a hőmérséklet növekedésével monoton csökken. A rendparaméter folyadékkristály állapotban 0,8—0,4 közötti értéket vesz fel.



#### 4. Maier—Saupe-elmélet

Ez a nematikus folyadékkristályok orientációját leíró elmélet [2] a Weiss-féle ferromágneses elmülethez hasonlóan egy átlagtér-közelítés. Az elmélet posztulál egy rendező potenciált:

$$U = - \frac{A}{V^2} (3 \cos^2 \theta - 1) S$$

$V$  a moláris térfogat,  $S$  a rendparaméter,  $A$  a nyomástól, térfogattól, hőmérséklettől független konstans.

Az elméletből nyert potenciál segítségével megadható a szög szerinti eloszlás függvény:

$$f(\theta) = \frac{1}{Z} e^{-U/kT} = \frac{1}{Z} \exp \left( \frac{3AS}{VkT} \cos^2 \theta \right)$$

A Maier—Saupe-féle modell mai napig a legjobban működő elmélet. Folynak a kísérletek a módosítására (pl. a potenciál térfogatfüggése:  $\sim V^{-1}$ ;  $V^{-4}$ ), de nem sok sikerrel. Az elmélet hiányossága, hogy a szomszédok kölcsönhatását nem veszi figyelembe.

## II. FEJEZET

### 1. Elméleti áttekintés

A reaktorból kijövő monokromatikus neutronnyaláb minden részecskéjét egy síkhullám írja le:

$$\psi(r) = e^{ik_0 z},$$

ahol  $k_0$  a beeső részecske hullámszám vektora.

A szórt hullám egy gömbhullám:

$$\psi(r) = - \frac{b}{r} e^{ik}$$

$b$  a szórási hossz,  $k$  a szórt részecske hullámszám vektora. A szórási hossz értéke pozitív és negatív lehet, sőt ha véges valószínűséggel neutronelnyelés is van, akkor komplex szám. A különböző magokra vonatkozó értékei táblázatokban megtalálhatók. Az erős kölcsönhatásoknak jelenleg nincs egy egységes, könnyen kezelhető elmélete. Így a neutron nukleáris részecskéken való szóródásának tárgyalása fenomenologikus úton történik. A nukleáris erők rövid hatótávolságúak, de erősek. Mégis a perturbációs számítás első rendje Born közelítésében MeV energiákig jó eredményt ad. Mi MeV energiájú neutronokkal dolgozunk. A hatáskeresztmetszet:

$$d\sigma = \left( \frac{m}{2\pi\hbar} \right)^2 |\langle k | \hat{V} | k_0 \rangle|^2 d\Omega, \quad (1)$$

ahol

$$\langle k | \hat{V} | k_0 \rangle = \int dr \psi_k^*(r) \hat{V} \psi_{k_0}(r).$$

A kifejezésben szereplő potenciált

$$V(r) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_L b_L \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_L) \quad (2)$$

alakban vesszük fel.  $R_L$  az  $L$ -ik nukleon helyvektora. Ezt a lassú neutronspektroszkópia alapvető fogalmát Fermi féle pszeudopotenciálnak nevezzük. Beírva a potenciált (1)-be, az átlagolásokat elvégezve a következő kifejezést kapjuk, a kétszer differenciális hatáskeresztmetszetre:

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E} = \frac{k}{k_0} \left( \frac{m}{2\pi\hbar} \right)^2 \sum_{\lambda\sigma} p_\sigma p_\lambda.$$

$$\sum_L |\langle \sigma' \lambda' | \sum_L b_L \exp(i\mathbf{Q}\mathbf{R}_L) | \sigma \lambda \rangle|^2 \delta(\hbar\omega + E_\lambda - E_{\lambda'}).$$

Ez az egyenlet a neutronspektroszkópia alapvető kifejezése.

*Van Hove* számította ki egy tetszőleges atomi rendszer termikus neutronokra vonatkozó hatáskeresztmetszeit Born közelítésben [3]. Kimutatta, hogy a kétszer differenciális hatáskeresztmetszet szoros kapcsolatban van az időtől függő korrelációs függvényekkel.

$$\frac{d\sigma^2}{d\Omega d\omega} = \frac{\sigma}{4\pi} \frac{k}{k_0} S(\mathbf{Q}; \omega), \quad (3)$$

ahol

$$S(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int G(\mathbf{r}, t) e^{i(\mathbf{Q}\mathbf{r} - \omega t)} d\mathbf{r} dt. \quad (4)$$

Az időtől függő korrelációs függvény:

$$G(\mathbf{r}; t) = \frac{1}{8\pi} \int d\mathbf{Q} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}} \sum_{LL'} e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{R}_L(0)} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_{L'}(t)} \quad (5)$$

$\mathbf{Q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$  impulzuscsere

$\hbar\omega = E_0 - E$  energiacsere

$R_L(t)$  az időfüggő Heisenberg operátor

$$\sigma = 4\pi \overline{b_L^* b_{L'}}.$$

A klasszikus közelítés lehetőségével Schofield foglalkozott [4]. Klasszikus közelítésben a  $G_s(\mathbf{r}, t)$  önkorrelációs függvény annak a valószínűségét adja, hogy egy atomot a  $t$  időpillanatban az  $\mathbf{r}$  helyen találunk olyan feltétel mellett, hogy ugyanez az atom a  $t=0$  időpillanatban az  $\mathbf{r}=0$  helyen tartózkodott. A párkorrelációs függvény  $G_d(\mathbf{r}, t)$  egy atom  $\mathbf{r}$  helyen tartózkodásának valószínűsége a  $t$  időpillanatban azon feltevés mellett, hogy  $t=0$  időpontban egy másik atom az  $\mathbf{r}=0$  helyen tartózkodott.



A  $G(\mathbf{r}, t)$  függvény a párkorrelációs és önkorrelációs függvény összege:

$$G(\mathbf{r}, t) = G_s(\mathbf{r}, t) + G_d(\mathbf{r}, t). \quad (6)$$

Ha  $b_L = b$  vagyis minden atomnak egyenlő a szórási hossza, akkor koherens szórásról beszélünk, ellenkező esetben inkoherens a szórás. A kétszer differenciális hatás-keresztmetszet így két tag összegeként írható fel:

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial \omega} = \left( \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial \omega} \right)_{\text{ink}} + \left( \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial \omega} \right)_{\text{koh}}, \quad (7)$$

ahol

$$\left( \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial \omega} \right)_{\text{koh}} = \frac{\sigma_{\text{koh}}}{4\pi} \frac{k}{k_0} S(\mathbf{Q}; \omega), \quad (8)$$

$$\left( \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial \omega} \right)_{\text{ink}} = \frac{\sigma_{\text{ink}}}{4\pi} \frac{k}{k_0} S_{\text{ink}}(\mathbf{Q}; \omega). \quad (9)$$

$S_{\text{ink}}$  a  $G_s(r, t)$  tér és időkoordináták szerinti Fourier transzformáltja. Célszerű bevezetni az ún. közbenső korrelációs függvényt

$$I(\mathbf{Q}; t) = \langle \sum_n \exp[-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}(0)] \exp[i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_n(t)] \rangle, \quad (10)$$

$$I_s(\mathbf{Q}; t) = \langle \exp[-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}(0)] \exp[i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}(t)] \rangle. \quad (11)$$

Ebből a szórásfüggvényt időszerinti Fourier transzformációval kapjuk.

$$S(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int e^{-i\omega t} I(\mathbf{Q}, t) dt \quad (12)$$

$$S_{\text{ink}}(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int e^{-i\omega t} I_s(\mathbf{Q}, t) dt. \quad (13)$$

Fizikai információt egy rendszerről a korrelációs függvények adnak. Alakjukat kétféle képpen határozhatjuk meg:

1. Kiszámítjuk kettős Fourier transzformációval a megmért szórásfüggvényből.
2. Ismereteink alapján egy modellt választunk a vizsgált jelenség leírására, kiszámítjuk a hozzá tartozó szórásfüggvényt, és ezt bizonyos paraméterek változtatásával illesztjük a mért pontokra.

Az első esetben  $[-\infty; \infty]$  intervallumon kell integrálni a Fourier transzformációnál. Mivel a mérések általában csak egy bizonyos tartományon végezhetők el, ennek kiterjesztését extrapolációval kell elvégezni. Így az eredmény bizonytalan lesz. Ezért célszerű az utóbbi módszert alkalmazni.

A jelen dolgozatban mi is ezt az utóbbi módszert alkalmazzuk.

## 2. Neutronfizikai lehetőségek

A szórás koherens és inkoherens részből tevődik össze. Inkoherens szórás esetén a molekulák egyedi mozgásáról kapunk információt, a koherens szórás pedig a kollektív mozgásokról ad számot.

Az általunk vizsgált folyadékkristályok H, C, N, O, tartalmú anyagok. Ezek az anyagok hatáskeresztmetszetei a következők:

	$\sigma_{\text{koh}}$ [barn]	$\sigma_{\text{ink}}$ [barn]
H	1,7	80
C	5,5	0
N	11,1	0
O	4,2	0

A táblázatból kitűnik, hogy a hidrogén inkoherens szórása lesz a domináns folyamat. Így a kétszer differenciális hatáskeresztmetszetben az önkorrelációs függvény szerepel. A hozzátartozó közbenső korrelációs függvény:

$$I_s(\mathbf{Q}, t) = \langle \exp \{i\mathbf{Q}[\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)]\} \rangle. \quad (14)$$

A mozgások modellezése céljából két feltevéssel élünk:

1. A szórási folyamat nem gerjeszti a molekula kvantumos energianívóit.
2. A különböző mozgások egymástól függetlenül játszódnak le.

Egy molekula egy atomjának a legáltalánosabb mozgása is leírható a molekula tömegközéppontjának translációjával, rotációjával és az atom vibrációjával.

A vizsgált anyag hidrogénjeinek mozgását mi is így írjuk le. Ebből a célból írjuk fel a proton helyvektorát, mint három vektor összegét:

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{R}(t) + \mathbf{d}(t) + \mathbf{u}(t), \quad (15)$$

ahol  $\mathbf{R}(t)$  a tömegközéppont helyvektora,

$\mathbf{d}(t)$  a forgást leíró koordináta,

$\mathbf{u}(t)$  a rezgést leíró koordináta.

Ezeket felhasználva a közbenső korrelációs függvény három tényezőre esik szét:

$$I_s(\mathbf{Q}, t) = I_{\text{tr}}(\mathbf{Q}, t) I_{\text{rot}}(\mathbf{Q}, t) \cdot I_{\text{vib}}(\mathbf{Q}, t). \quad (16)$$

A mi esetünkben a rezgő mozgást a Debye—Waller faktor segítségével tudjuk figyelembe venni.

$$I_{\text{vib}}(\mathbf{Q}, t) = \exp(-\mathbf{Q}^2 \langle \mathbf{u}^2 \rangle), \quad (17)$$

ahol  $\langle \mathbf{u}^2 \rangle$  az amplitúdó négyzetének átlaga. Képezzük Fourier transzformációval a szórásfüggvényt. Felhasználva a szorzat Fourier transzformációjára vonatkozó



tételt; a szórásfüggvény a rotációs és translációs rész konvolúciója megszorozva a Debye—Waller faktoral:

$$S_{\text{ink}}(\mathbf{Q}; \omega) = 2\pi \exp(-Q^2 \langle u^2 \rangle) \int S_{\text{tr}}(\mathbf{Q}; \omega') S_{\text{rot}}(\mathbf{Q}; \omega - \omega') d\omega'. \quad (18)$$

Hasonló módon kaphatjuk meg az atomok mozgását leíró önkorrrelációs függvényt is.

A hatáskeresztmetszetre vonatkozó eddigi számításaink egy Dirac-delta mintára eső nyalábra vonatkoztak. Egy véges szélességű  $f(E_0) dE_0$  bemenő spektrum esetén a bemenő spektrumnak és az eddig számolt hatáskeresztmetszetnek a „faltungja” adja a kétszer differenciális hatáskeresztmetszetet.

### III. FEJEZET

#### 1. A korrelációs mérési technika alapjai

A neutron energiája és sebessége között egyértelmű összefüggés van. Ez teszi lehetővé, hogy egy ismert repülési távolságon mért repülési időből meghatározzuk a neutron energiáját. Ez a repülési idő (time-of-flight) analízis a neutronspektroszkópia alapvető módszerei közé tartozik.

A klasszikus módszer esetében egy indítójel jelzi azt az időpontot, amikor a neutron áthaladt a szaggatón és a detektorból kijövő jel pedig detektálja a neutron becsapódását. A repülési időt az időanalizátor méri. A szaggatás gyakoriságának határt szab az, hogy egy nyitott állapotban áthaladt nyaláb leglassúbb neutronjának is be kell érkezni addig az időpillanatig, amíg a következő nyitott állapotból érkező leggyorsabb neutron beérkezik. Ezért ez a módszer a reaktorból érkező nyaláb 1 %-át használja ki.

Ezért kidolgoztak egy új technikát, mely jobb kihasználtsággal működik. Ez a korrelációs repülési idő technika, melyet először *Mogilner és társai* [11] javasoltak. A technika elméleti alapja a következő:

Essen egy monokromatikus, időben Dirac-delta eloszlású neutronnyaláb a vizsgált anyagmintára. A fizikai információt a repülési út végén, a detektornál a nyaláb időbeli eloszlása  $h(t)$  adja. Egy  $X(t)$  eloszlású bemenő nyaláb esetén, a kijövő nyaláb eloszlása

$$Y(t) = \int_0^\infty h(\tau) X(t-\tau) d\tau \quad (19)$$

lesz. A jelenséget tárgyalhatjuk korrelációs függvények segítségével. Így az egyenletünk a következő alakban írható:

$$R_{xy}(t) = \int_0^\infty h(\tau) R_{xx}(t-\tau) d\tau, \quad (20)$$

ahol

$$R_{xx}(t) = \overline{X(\tau)X(t+\tau)}$$

$$R_{xy}(t) = \overline{X(\tau)Y(t+\tau)} \quad (21)$$

önkorrelációs és keresztkorrelációs függvény. Ha  $X(\tau)$  és  $Y(\tau)$  stacionárius és ergodikus valószínűségi függvények, akkor a két korrelációs függvény a következő alakban írható:

$$R_{xx}(t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^{\infty} X(\tau) X(t+\tau) d\tau$$

$$R_{xy}(t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^{\infty} X(\tau) Y(t+\tau) d\tau. \quad (22)$$

Ha a bemenő spektrum fehér zaj, akkor  $R_{xx}(t) = \delta(t)$ .

Így

$$R_{xy}(t) = h(t). \quad (23)$$

Ebben az esetben tehát a keresztkorrelációs függvény hordozza a fizikai információt. A fehér zaj eloszlást egy pseudo-véletlen beosztású szaggatóval állítjuk elő, a keresztkorrelációs függvényt számítógéppel számítjuk ki.

A módszer nagy előnye, hogy a háttérsugárzás, mivel a modulációval nem korrelált, a végeredményből kiesik. A neutronnyaláb kihasználtsága ebben az esetben 50%-os, mert a szaggató fele-fele arányban van nyitott, illetve zárt állapotban.

## 2. A mérőberendezés leírása

A mérések elvégzéséhez a KFKI VVRM reaktorának 9. csatornájánál működő repülési idő spektrométert használtuk. A berendezés a következő fő részekből áll:

- a) Polikristályos Be szűrő.
- b) Orientált grafit monokromátor.
- c) Stohasztikus szaggató.
- d) Fűthető mintatartó.
- e) Árnyékolt repülési út.
- f) Detektor.
- g) 4 K tároló.

### a) Polikristályos Be szűrő

A szűrő kis abszorpciós hatáskeresztmetszettel rendelkező polikristályos anyag körülvéve egy jól abszorbeáló anyaggal. A szűrő a Maxwell spektrumból Bragg szórással a  $2d = \lambda_{kr}$  hullámhossznál kisebb hullámhosszú neutronokat kiszorja. Így egy olyan maradékspektrum lesz a szűrő után, melyre  $\lambda \geq \lambda_{kr}$ . Nálunk egy 200 mm hosszú 150 mm átmérőjű Be szűrő állítja elő a szűrt hidegneutron nyalábot. A szűrő Cd-mal és  $B_4C$ -tal van körülvéve, hogy egyrészt a nyalábból kiszórt neutronokat abszorbeálja, másrészt meggátolja, hogy a szűrt nyalábba kívülről behatoljanak neutronok. A nagyobb transzmisszió elérése céljából célszerű a polikristályos szűrőt lehűteni. Így a lassú neutronok rugalmatlan szórása (fononszórás) kisebb lesz a fononok befagyása miatt. Ilyen módon egy nagyságrend intenzitás növekedés érhető el. Jelen esetben a hűtőanyag cseppfolyós nitrogén.



## b) Orientált grafit monokromátor

A Be szűrőn keresztülhaladt nyaláb az orientált grafit monokromátorra esik. Ha egy nyaláb  $\theta$  szögben esik a kristály  $(h, k, l)$  síkjára, akkor a Bragg szórás törvénye szerint a szórt neutronok hullámhosszát a

$$n\lambda = 2d_{(h,k,l)} \sin \theta \quad (24)$$

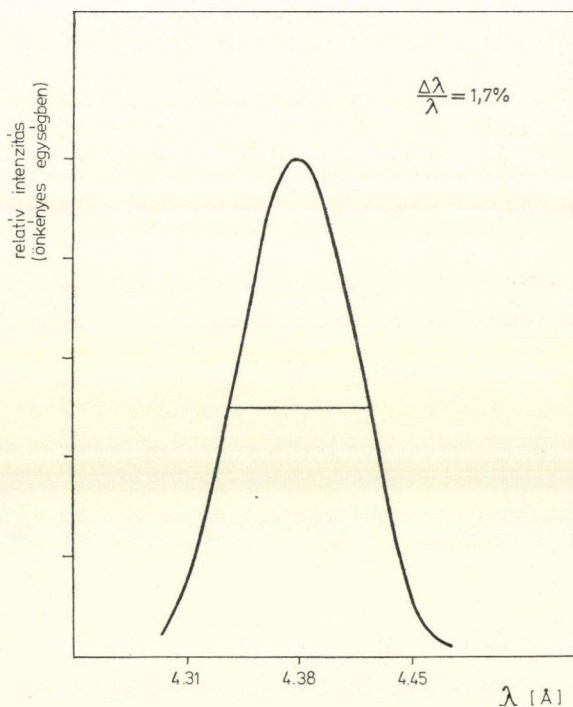
összefüggés határozza meg, ahol  $d_{(h,k,l)}$  a  $(h, k, l)$  Miller indexű síkok távolsága.

A spektrométernél  $\theta = 40,67^\circ$ , így a Bragg feltételnek megfelelően  $\lambda = 4,38 \text{ \AA}$ .

A magasabbrendű reflexiók intenzitása a Be szűrő alkalmazása eredményeként elhanyagolható, mivel az ilyen hullámhosszú neutronokat a szűrő kiszórja a nyalábból.

Az általunk használt orientált grafitkristálynak a mozaik szórása  $30'$ , így a felbontás:

$$\text{ctg } \theta \Delta\theta = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} = 0,017. \quad (25)$$



4. ábra. A minta eső neutron spektrum

## c) Stohasztikus szaggató

A szaggató egy vízszintes tengely körül forgó tárcsa, melyen 255 osztás van. A tárcsán az áteresztő, illetve az át nem eresztő osztások egy  $2^8-1$  periódushosszú bináris pszeudó véletlen sornak megfelelően helyezkednek el. Egy osztás középszélessége 8 mm, nagysága 40 mm.

A tárcsa dúralumíniumból készült. Az elnyelő osztások helyén  $Gd_2O_3$  van, mely abszorbeálja a neutronokat. A tárcsa átmérője 670 mm. A meghajtás villanymotorral történik 6000 fordulat/perc fordulatszámmal.

A neutronok egy  $8 \times 40 \text{ mm}^2$  méretű ablakon haladnak át közvetlenül a forgó tárcsa előtt. Így a grafitkristályról jövő és ezen az ablakon áthaladó nyaláb divergenciája igen kicsi. A chopperhez tartozik egy mérésengedélyező automatika. Ez mintavételes technikával méri a chopper egy körülfordulásának idejét. Ha ez az idő a megengedett hibahatáron belül van ( $\pm 100 \mu \text{ sec}$ ), akkor a következő ciklusra engedélyezi a mérést, egyébként letiltja a detektorkimeneteket. Így az effektív mérési idő a teljes időnek kb. 80 %-a.

#### d) Fűthető mintatartó

A termotróp folyadékkristályok bizonyos hőmérsékleti intervallumban vannak folyadékkristályos állapotban. Így egy kályhában kell elhelyezni a vizsgálandó anyagot. A kályha alumínium ablakai között 1 mm vastag hely van az anyag számára. A kályha elektromos árammal van fűtve és egy termopárral mérjük  $q$  hőmérsékletét. Egy automatika stabilizálja a hőmérsékletet. Az ingadozás:  $\pm 0,2^\circ \text{C}$ .

#### e) Árnyékolt repülési út

Ez egy duplafalú cső, melyben repülve jutnak el a neutronok a detektorokhoz. A falak között kb. 25 cm vastag vízréteg van. Belül Cd-mal van bélelve, és a belseje argonnal megtöltve.

Az árnyékolt repülési út célja kettős: egyrészt csak a minta irányából érkező neutronokat engedi eljutni a detektorhoz és mivel az argon sokkal kisebb szórási hatáskeresztmetszettel rendelkezik, mint a levegő, így a mintáról érkező neutronnyalábból kevesebb szóródik ki.

Az árnyékolt repülési út végében helyezkednek el a detektorok.

#### f) Detektorok

Egy detektor egység 8 db 50 cm hosszú és 5 cm átmérőjű cső alakú proporcionális számlálóból áll. Ezek 98 %-ra dúsított  $B_{10}$ -el töltött  $BF_3$  számlálók. Ezekben a nyomás 600 Hgmm körül van. Egy ilyen egység mérőfelülete  $400 \times 500 \text{ mm}^2$ . Az ilyen számlálók a neutronbefogás után keletkezett alfa részecskék ionizációját használják fel a beérkezett neutronok jelzésére. A határfoka 4 A-nál  $\eta \approx 60\%$ . 4 detektor egység van egymás mellett elhelyezve, így egyidejűleg 4 szögben lehet mérni. Ezek a következők:

1. detektor	$51^\circ$	$Q = 1,24 \text{ Å}^{-1}$	$Q$ az impulzusátadás
2. detektor	$45^\circ$	1,1	
3. detektor	$39^\circ$	0,96	
4. detektor	$33^\circ$	0,81	

Abból a célból, hogy a reaktor teljesítményének fluktuációját figyelembe tudjuk venni, egy monitort használunk. Ez a reaktorból kijövő nyalábban van elhelyezve. A monitor egy vékony uránhasadási kamra. Határfoka:  $\eta \sim 1\%$ .



*g) 4 K tároló*

A mintán szórt neutronok energieloszlását a detektorokkal és egy sokcsatornás időanalizátor segítségével állapítjuk meg.

A detektorból érkező jel először egy előerősítőbe megy, utána egy erősítőbe, majd egy diszkriminátorba. 4 ilyen egység van a 4 detektorhoz.

A négy diszkriminátor jele egy coder-be megy. Ennek három kimenete van. Az első a detektorjel megy, a másik kettő a detektorszám kód.

A coder-ből érkező detektorjel a mérésengedélyező automatikába, onnan a 4 K tárolóba jut, melynek  $4 \times 1020$  csatornája van. A keresztkorrelációs függvény kiszámítása TPA—1001 típusú számológépen történik.

## IV. FEJEZET

### 1. A PCILO és CNDO/2 kvantumkémiai közelítő módszer

A kvantumkémiai számítások közül a legpontosabb eredmények az ún. *ab initio* módszerekkel kaphatók. A módszerek nem használnak fel kísérleti eredményeket. Hátrányuk a rendkívül nagy számítógép-kapacitás igénye, mely lehetetlenné teszi a nagyobb méretű molekulák esetén való alkalmazhatóságukat. Ezért terjedtek el az ún. félempirikus módszerek, melyek nagy molekulák esetében is használhatók. Ezek a módszerek az elméleti úton nehezen számítható mennyiségeket mért vagy becsült értékekkel helyettesítik. Több ilyen módszer ismeretes. Jelen dolgozatban mi a CNDO/2 és PCILO módszereket használjuk.

A PCILO [12] (Perturbative Configuration Interaction using Localized Orbitals) módszer a perturbációszámításon alapszik. Az energiát harmadrendű korrekcióig bezárólag számítja. A program, mely a periódusos rendszer első három periódus atomjaira vonatkozik, a QCPE-nél hozzáférhető [13]. Sikeresen alkalmazták nagyobb molekulák konformációs analizisére [14].

A CNDO/2 [15] (Complete Neglect of Differential Overlap) program az SCF módszeren alapszik. Iterációs módszer, ezért jelentős a gépidő igénye. A differenciális átfedéseket elhanyagoló módszer. A CNDO/2 program számítógép időigénye 10-szer több a nagy molekulák esetén, mint a PCILO módszeré. A tapasztalatok szerint alulbecsüli a rotációs barriereket [16, 17].

Próbaszámításokat végeztünk metanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ) molekulára PCILO módszerrel  $V_3 = 0,8 \text{ kcalmol}^{-1}$  adódott a metil gyök rotációs barrierjének, míg a mért érték:  $1,07 \text{ kcalmol}^{-1}$ . A számított és más irodalomban talált értékek alapján  $\pm 0,3 \text{ kcalmol}^{-1}$ -ra becsüljük a számítás hibáját.

Az irodalomban található számítások szerint merev modell esetén CNDO/2 módszerrel,  $0,67 \text{ kcalmol}^{-1}$  adódik a metanol rotációs barrierjének [18]. Ha a kötéshosszak és szögek szerint optimalizálunk, akkor  $1,29 \text{ kcalmol}^{-1}$  a barrier [19]. A CNDO/2 módszernek  $0,3 \text{ kcalmol}^{-1}$ -ra becsüljük a hibáját.

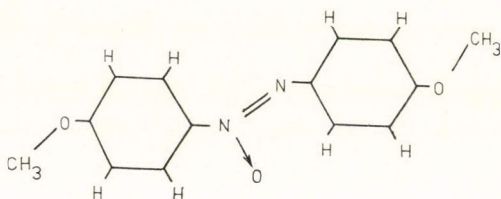
### 2. PAA molekulára végzett számításaink

A para-azoxy-amizol (PAA) molekula szerkezeti képlete 6 lehetőséget enged meg a forgásra. A két végen a két metilcsoport és a két metoxycsoport foroghat. Ezen kívül a belső részen a két bezolgyűrű elforoghat a C—N tengely körül.

a) Metil-, metoxycsoport forgása

A rendelkezésünkre álló korlátozott számítógép kapacitása miatt a molekulát a 6. ábrán látható módon modelleztük.

A modellezés jóságát bizonyítja az a tény, hogy a levágott molekulán és a teljes molekulán végzett ellenőrző számítás között 0,1 kcalmol<sup>-1</sup>-nél kisebb volt az eltérés a metil- és metoxycsoport forgási barrierjében.



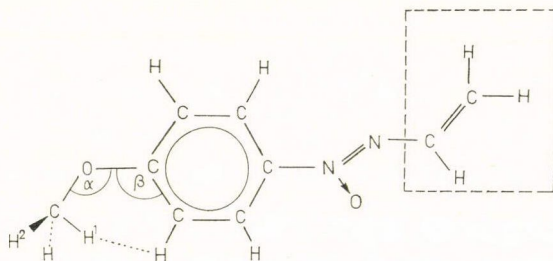
5. ábra. PAA molekula

Ezen kívül a bekeretezett részt 180°-kal elforgatva a barrier nem változott meg szignifikáns módon. Mindezekből arra következtetünk, hogy a forgórésztől távol eső molekularészek nem befolyásolják a barrier.

A kiindulási geometriában a kötésszögeket és a kötéstávolságokat

Krigbaum és munkatársai [20] röntgen diffrakciós mérése alapján kapott értékekből választottuk ki.

Első lépésben merev modellel számoltunk. A metilcsoport O—C tengely körüli rotációs barrierjének PCILO módszerrel 2,8 kcalmol<sup>-1</sup> adódott, míg CNDO/2 mód-



6. ábra. PAA molekula modellje

szerrel 3,0 kcalmol<sup>-1</sup>. Ezután vizsgáltuk a barrier változását  $\alpha$  és  $\beta$  szög függvényében. A számítások azt mutatták, hogy az  $\alpha$  szög lényegében merevnek tekinthető a forgás közben, míg a  $\beta$  nem.  $\beta$  szög szerint optimalizált barrier PCILO módszerrel 3,85 kcalmol<sup>-1</sup>.

A minimumhely nyitott állásnál volt. A forgatás alatt  $\beta$  szög 118,7°—111,7° között változott, míg  $\alpha$  szög 125,2° volt. A barrier  $\Delta\gamma=10^\circ$ -ként számítottuk ki. A potenciált 2% pontossággal a

$$V(\gamma) = \frac{V_3}{2} (1 - \cos 3\gamma)$$

függvény írja le, ahol  $V_3=3,85$  kcalmol<sup>-1</sup>,  $\gamma$  a metilcsoport O—C tengely körüli elfordulásának szöge. PCILO módszerrel optimalizált geometriánál, CNDO/2 módszerrel számított barrier: 4,2 kcalmol<sup>-1</sup>.

A barrier szögfüggése, vagyis a  $H^1 \dots H$  távolságfüggése azt mutatja, hogy a barrier kialakításában lényeges szerepet játszik a nemkötő  $H^1 \dots H$  kölcsönhatás. Való-



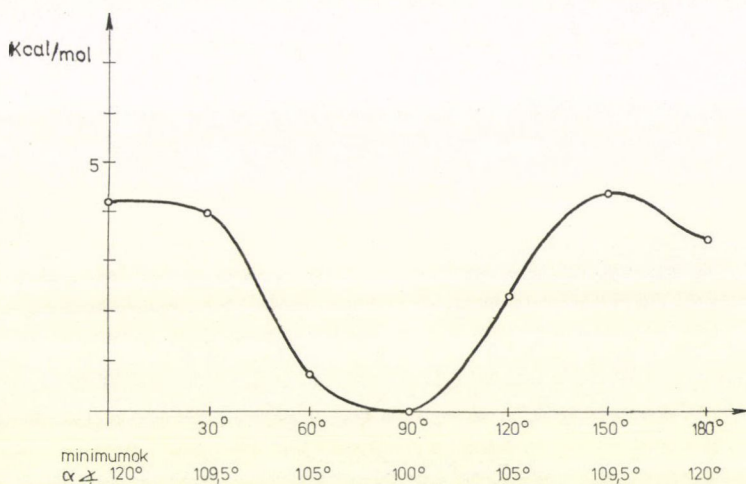
színű ez a kölcsönhatás felelős a  $\alpha$  szög  $109,47^\circ$ -os tetraéderes szögnél nagyobb voltaért.

*Pócsik I.* NMR módszerrel végzett mérései szerint [21] szilárd fázisban a metilcsoport forgása  $-150^\circ\text{C}$ -on beindul és a rotációs barrierje  $3,7\text{ kcal/mol}^{-1}$ .

*Hervet és munkatársai* [22] hasonló vizsgálatokat végeztek neutronszórással.  $\text{CH}_3$  csoport rotációs barrierjének  $3,51\text{ kcal/mol}^{-1}$  értéket kaptak.

Összességében szép egyezést mutat a kísérletileg mért és az elméletileg számolt érték.

Hasonló módon vizsgáltuk a metoxycsoport forgását.  $\alpha$  szöget  $120^\circ$ -nak vettük,  $\beta$  szöget változtattuk. PCILO módszerrel számított rotációs barrier:  $4,5\text{ kcal/mol}$ -nak adódott. Forgás közben  $\beta$  szög  $100^\circ$ – $120^\circ$ -ig változott. A barrier legkisebb értékénél a  $\text{C—O—C}$  kötések síkja merőleges volt a benzolgyűrű síkjára.



7. ábra. Metoxy-forgás barrierje

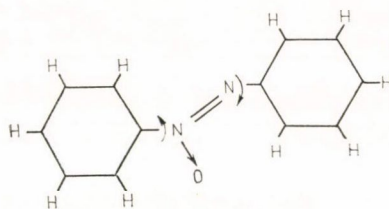
*Krigbaum és munkatársai* mérése szerint ez a két sík szilárd fázisban egybeesik [20]. Újabb mérések szerint [23] vannak PAA-nak olyan szilárd módosulatai, melyben a két sík merőleges egymásra.

A PCILO módszer hibája, hogy a benzolgyűrűben lokalizált kettőskötésekkel dolgozik. Így a különböző Kekule szerkezetek egymástól eltérő eredményeket adnak. Az oxigénben levő magányospár konjugálódik a benzolgyűrű kettőskötésével, ezért aszimmetrikus a metoxy forgás barrierje (7. ábra). Vizsgáltuk az ebből adódó eltérés nagyságát. Tapasztalataink szerint az ebből adódó bizonytalanság  $2\text{ kcal/mol}^{-1}$ -et is meghaladhatja, pl. dimetoxi-benzol.

#### b) Belső forgások

A limitált számítógép kapacitás miatt a molekula két végén levő  $\text{O—CH}_3$  csoportot  $\text{—H}$ -nel helyettesítettük. Így azoxy-benzol molekulát kaptunk.

Az előzőekhez hasonló nehézségek mutatkoznak ennél a számításnál is. PCILO módszer esetében a különböző Kekule szerkezetek más-más eredményt adtak. A szá-



8. ábra. Azoxy-benzol molekula

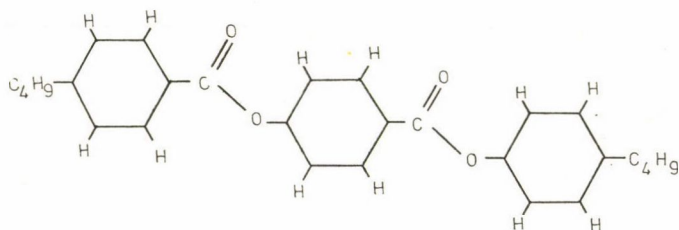
mításokból leszűrhető azonban az a kvalitatív megállapítás, hogy a két benzolgyűrű nincs egy síkban, mely *Krigbaum és munkatársai* [20] méréseiből is kiderül.

CNDO/2 módszerrel az eddigi ismereteink alapján nem is próbálkoztunk, mert ez a módszer II rendszereket tartalmazó molekulalánc rotációs gátjaira rossz eredményeket szokott adni [24].

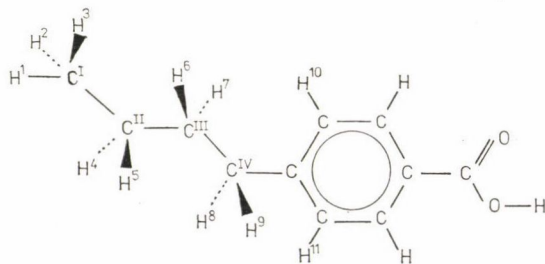
### 3. DB—PBB molekulára végzett számításaink

Ez a molekula a dibutil-fenil-p'-benzoiloxi-benzoát (DB—PBB) a PAA-nál nagyobb, három benzolgyűrűt tartalmaz. A molekula két végén egy-egy butil lánc található.

A PAA molekulára végzett számításaink leírásakor utaltunk a belső forgások vizsgálatánál meglevő nehézségekre. Így itt ezzel egyáltalán nem foglalkoztunk, csak a végeken levő butil csoport forgását vizsgáltuk. A rendelkezésünkre álló limitált számítógép-kapacitás miatt a molekulát itt is a 10. ábrán látható módon modelleztük.



9. ábra. DB—PBB molekula



10. ábra. A modell

Az ilyenfajta modell helyességét már a PAA molekula vizsgálatánál elemeztük.

#### a) $-CH_3$ csoport forgása

A metilcsoport forgatásakor a butil lánc négy szénatomja a 10. ábrán látható módon a benzolgyűrű síkjában helyezkedett el  $\alpha$  szöget változtatva optimalizáltuk a po-



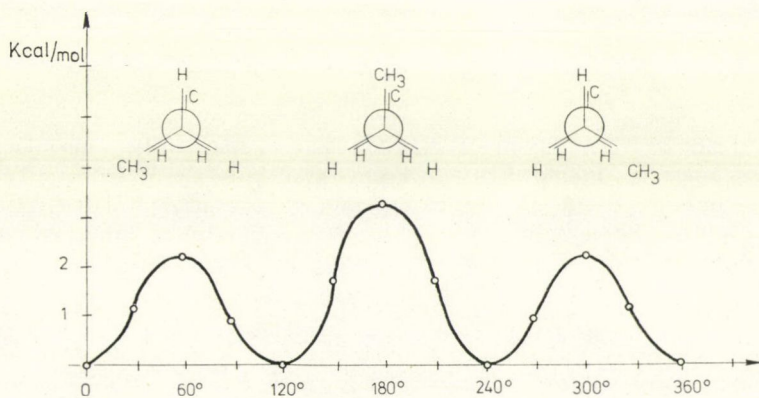
tenciált. A metilcsoport rotációs barrierjének PCILO módszerrel  $V_3 = 2,45 \text{ kcal/mol}^{-1}$ -nek adódott. A potenciál alakját  $0,01 \text{ kcal/mol}^{-1}$ -nél kisebb eltéréssel a

$$V(\gamma) = \frac{V_3}{2} (1 - \cos 3\gamma) \quad \gamma \text{ a torziós szög}$$

függvény írja le. A minimális energiát  $\alpha = 115^\circ$ -nál kaptuk, de  $\alpha$  változtatása nagyon kis mértékben befolyásolta a barrieret, pl.  $\alpha = 109^\circ$ -nál a barrier  $2,50 \text{ kcal/mol}^{-1}$ -nek adódott. A minimumhely nyitott állásnál van,  $\text{H}^{\text{I}}\text{C}^{\text{I}}\text{C}^{\text{II}}\text{C}^{\text{III}}$  torziós szög  $= 180^\circ$ . A barrieret  $\Delta\gamma = 10^\circ$ -ként számítottuk ki.

b)  $-\text{CH}_2-\text{CH}_3$  csoport forgása

Az etilcsoport forgatásakor  $\alpha$  szöget változtattuk és az ábrán látható konformációnál rögzítettük a torziós szög ( $\varepsilon$ ) zérus pontját. A  $\text{H}^{\text{I}}\text{C}^{\text{I}}\text{C}^{\text{II}}\text{C}^{\text{III}}$  torziós szöget a forgatás során a metilcsoport nyitott állásának megfelelő  $180^\circ$ -os értéken tartottuk. A barrieret  $\Delta\varepsilon = 30^\circ$ -ként számítottuk ki, és az ábrán látható potenciált kaptuk. Az  $\alpha$  szög  $109^\circ$ — $115^\circ$ -ig változik az optimalizálás során, mely a barrieret jelentős mértékben befolyásolja. A számításból kitűnik, hogy itt is nagy szerep jut a nemkötő  $\text{H} \dots \text{H}$  kölcsönhatásnak. A legnagyobb potenciálcúcsot akkor kaptuk, amikor  $\text{H}^4$  és  $\text{H}^5$  fedő állásban volt  $\text{H}^6$  és  $\text{H}^7$ -tel. Két kisebb csúcs pedig akkor adódott, amikor egy-egy hidrogén volt csak fedő állásban, így a taszítás kisebb. A benzolgyűrűt forgattuk és vizsgáltuk hogy mennyire befolyásolja a barrieret. Az eredmény a benzolgyűrű síkját elforgatva a barrier nem változott.

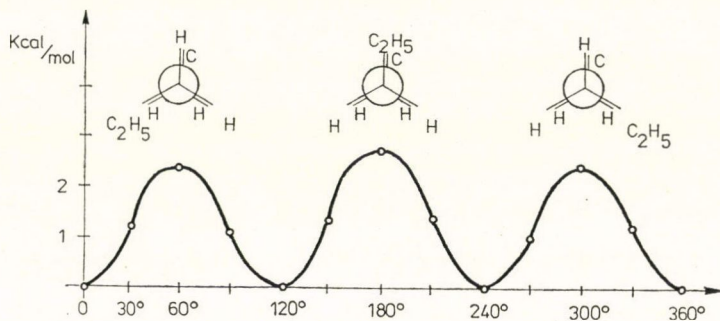


11. ábra. Az etilcsoport forgásának barrierje

c)  $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$  csoport forgása

Ha az ábrán látható elrendezést választjuk kiindulási konformációnak, akkor a  $\text{H}^4, \text{H}^5 \dots \text{H}^{10}$  nemkötő kölcsönhatások annyira megnőnek, hogy a PCILO módszer végtelen nagy energiát szolgáltat.

Ezért  $90^\circ$ -kal elforgattuk a benzolgyűrű síkját és így végeztük a számításokat. Mint később látni fogjuk ez jogos, a butil forgatásakor ez a minimumhely. A propilcsoport forgatásakor szembetalálkozunk azzal a problémával, hogy a PCILO módszer a benzolgyűrűnél lokalizált kettős kötésekkel dolgozik, és áthelyezve a kettőskötéseket



12. ábra. A propilcsoport forgásának barrierje

ugyanannál a konformációnál más barrier adódik. Ez az effektus átlagosan  $0,2\text{--}0,3$  kcalmol $^{-1}$  bizonytalanságot okoz a számítások folyamán. Az itt megadott barrier a kétfajta kettős kötéssel számolt potenciál számtani közepe.  $\beta$  szög szerint optimalizáltunk.  $\beta$  szög  $112^\circ\text{--}115^\circ$  között változott az optimalizálás folyamán. Akárcsak a  $\text{—CH}_2\text{—CH}_3$  csoportnál, itt is fontosnak mutatkozott az optimalizálás hatása az energia gát magasságára. A barrieret  $\Delta\omega=30^\circ$ -ként számítottuk ki. A barrier jellege ugyanolyan, mint az etilcsoport forgási barrierje, de a két potenciálcúcs között itt kisebb a különbség.

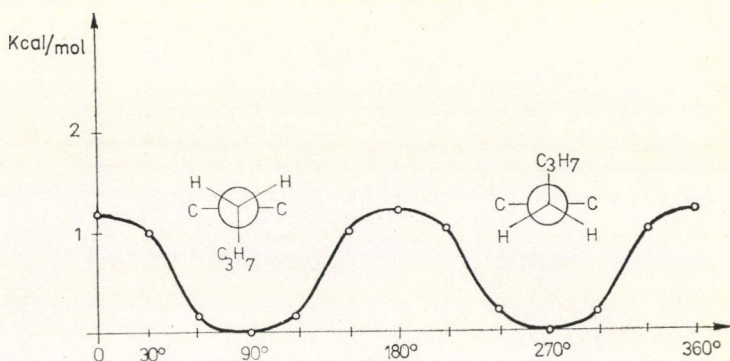
d)  $\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$  csoport forgása

A butilcsoport forgásánál  $\delta$  szög szerint optimalizáltuk a potenciált. A forgatás alatt a butil lánc az ábrán látható alakzatban helyezkedett el. Itt is problémát jelentett a benzolgyűrűben lokalizált kettős kötés. A kétfajta kettős kötéssel kiszámított potenciál számtani közepe itt is a barrier. A két potenciál között átlagosan  $0,7$  kcalmol $^{-1}$  volt az eltérés. A potenciált  $30^\circ$ -onként számítottuk ki. Az ábrán látható barrier adódott. A minimumhely akkor adódott, amikor a benzolgyűrű síkja merőleges volt arra a síkra, melyben a butil lánc szénatomjai helyezkednek el. Az optimalizálás során a  $\delta$  szög  $112^\circ$  és  $115^\circ$  között változott.

A butilcsoport forgatásakor a PCILO módszernél adódó, a kettős kötések okozta nagy bizonytalanság miatt a számítást elvégeztük CNDO/2-vel is. A nagy gépidő-igény miatt (egy konformáció két és fél óra) csak a minimum és maximum helynél számítottuk ki az energiát és nem optimalizáltunk. A PCILO módszerrel optimalizált geometriát használtuk kiindulási adatoknak. A CNDO/2 módszerrel így kapott barrier:  $2,2$  kcal/mol $^{-1}$ . Ez az érték  $1$  kcal/mol $^{-1}$ -al nagyobb a PCILO-val számítotttnál.

Ez az eredmény is erősen kétségessé teszi, hogy a PCILO módszernél a barrieret úgy tekintsük, mint a különböző Kekule szerkezet számtani közepe.





13. ábra. A butilcsoport forgásának barrierje

## V. FEJEZET

### 1. Anizotrop translációs diffúziós modell

Az izotrop modellt Vineyard [5] számolta ki. Ez az atomok bolyongását írja le. Az atomok sebessége a véletlen ütközések miatt rendszertelenül változik. A folyamatot a klasszikus diffúziós egyenlet írja le:

$$D\Delta G_S(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial G_S(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (26)$$

$D$  a makroszkopikus diffúziós állandó

$\Delta$  a Laplace operátor.

Legyen a kezdeti feltétel a következő:

$$G_S(\mathbf{r}, 0) = \delta(\mathbf{r}) \quad (27)$$

Így a parciális differenciálegyenlet megoldása:

$$G_S(\mathbf{r}, t) = (4\pi Dt)^{-\frac{3}{2}} \exp[-\mathbf{r}^2/4Dt]. \quad (28)$$

A  $t$  idő alatt megtett átlagos úthossz:

$$\langle [\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)]^2 \rangle = 6Dt \quad (29)$$

Fourier-transzformációval kapjuk a szórásfüggvényt:

$$S(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{DQ^2}{\omega^2 + (DQ^2)^2}. \quad (30)$$

Ez Lorentz-típusú görbe, melynek a félértékszélessége:

$$\Delta E = 2\hbar DQ^2. \quad (31)$$

A modell általánosítását anizotrop esetben Rosciszewski [6] adta meg. A diffúziós

állandó ebben az esetben tenzor  $D_{ij}$ . Alkalmasan választott koordináta-rendszerben ez diagonális:

$$D_{ij} = \begin{vmatrix} D_{\perp} & 0 \\ & D_{\perp} \\ 0 & D_{\parallel} \end{vmatrix}$$

ahol  $D_{\perp}$  a kitüntetett irányra merőleges,  $D_{\parallel}$  pedig a párhuzamos diffúziós állandó. A diffúziós egyenlet:

$$D_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} G_S(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} G_S(\mathbf{r}, t). \quad (32)$$

A belőle származtatható szórásfüggvény:

$$S_S(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{D_{ij} Q_i Q_j}{(D_{ij} Q_i Q_j)^2 + \omega^2}. \quad (33)$$

Legyen  $\theta$  a  $\mathbf{Q}$  és a direktor által bezárt szög. Ebben az esetben a szórásfüggvény:

$$S_S(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{(D_{\parallel} \cos^2 \theta + D_{\perp} \sin^2 \theta) \cdot \theta^2}{(D_{\parallel} \cos^2 \theta + D_{\perp} \sin^2 \theta)^2 Q^4 + \omega^4}. \quad (34)$$

A translációs diffúziós modell hosszú időkre érvényes határmodell.  $Q \rightarrow 0$  és  $\omega \rightarrow 0$  esetben írja le helyesen a molekulák mozgását.

## 2. Folytonos szférikus rotációs modell

Tekintsük a következő egyenletet:

$$I_r(\mathbf{Q}, t) = \langle \exp(i\mathbf{Q}[\mathbf{d}(t) - \mathbf{d}(0)]) \rangle. \quad (35)$$

Mivel a szórási folyamat a molekulákat nem gerjeszti, az atomoknak a tömegközépponttól mért távolsága időben állandó. Így a közbenső korrelációs függvény a következő alakban írható:

$$I_S(\mathbf{Q}, t) = \langle \exp(iQd[\cos \theta(t) - \cos \theta(0)]) \rangle \quad (36)$$

ahol  $\theta(t)$  a molekula a térben egy fix tengelyhez viszonyított orientációja. Ily módon a (36) kifejezhető Legendre-polinomok szerint:

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) j_l(Qd) F_l(t) \quad (37)$$

ahol  $j_l(Qd)$  a szférikus Bessel-függvény és

$$F_l(t) = (2l+1) \langle P_l[\cos \theta(t)] P_l[\cos \theta(0)] \rangle. \quad (38)$$

Ezt rotációs korrelációs függvénynek nevezik. A közbenső korrelációs függvény Fourier transzformáltja a következő szórásfüggvény:

$$S(Q, \omega) = j_0(Qd) \delta(\omega) + \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) j_l^2(Qd) F_l(\omega) \quad (39)$$



ahol

$$F_l(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int e^{-i\omega t} F_l(t) dt. \quad (40)$$

$F(\omega)$  meghatározásával *Sears* foglalkozott [7]. Ő a klasszikus diffúziós egyenletet átírta gömbi koordinátákra. Így a

$$D_r \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} \right] G(\omega, \omega_0, t) = \frac{\partial}{\partial t} G(\omega, \omega_0, t) \quad (41)$$

egyenletet kapta, ahol

$D_r$  rotációs diffúziós állandó

$\omega = \omega(\theta, \Phi)$

$G(\omega, \omega_0, t)$  annak a valószínűségét adja meg, hogy ha  $t=0$  időpillanatban  $d\omega_0$ -ban volt egy motekulához rögzített vektor, akkor mi a valószínűsége annak, hogy  $t$  időpillanatban  $d\omega$  lesz a vektor.

Ezt a parciális differenciál egyenletet a

$$G(\omega, \omega_0, t) = \frac{1}{4\pi} \delta(\omega - \omega_0) \quad (42)$$

kezdőfeltétel mellett megoldva kapta meg végül a rotációs korrelációs függvényt:

$$F_l(t) = e^{-l(l+1)D_r t}. \quad (43)$$

Ezt Fourier transzformáltjaként kapjuk:

$$F_l(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{[l(l+1)D_r]}{[l(l+1)D_r]^2 + \omega^2}. \quad (44)$$

Behelyettesítve a  $S(\mathbf{Q}, \omega)$  kifejezésébe kapjuk meg a folytonos szférikus rotációs modell szórásfüggvényét [8]:

$$S(\mathbf{Q}, \omega) = j_0(Qd)\delta(\omega) + \frac{1}{\pi} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) j_l^2(Qd) \frac{l(l+1)D_r}{[l(l+1)D_r]^2 + \omega^2}. \quad (45)$$

### 3. Egytengelyű rotátor rotációs diffúziója stohasztikus bolyongás alapján

A molekula, vagy valamely gyöke végezzen végtelen bolyongást  $N$  számú helyzet között.

Legyen egy pontból a szomszédos pontba való átmenet valószínűsége  $p$ . Ezzel a problémával a Markov-láncok elméletében találkozunk [9]. A jelenség matematikai interpretálása mátrixok segítségével történik. Egy lépés átmeneti mátrixa:

$$P^{(1)} = \begin{bmatrix} 1-2p & p & \dots & p \\ p & 1-2p & & \cdot \\ \cdot & p & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot \\ \cdot & & & p \\ p & \dots & p & 1-2p \end{bmatrix}. \quad (46)$$

Ez egy  $N$ -edrendű mátrix.  $n$  lépés után az átmenet mátrixa a következő lesz:

$$P^{(n)} = P^{(n-1)} P^{(1)} = [P^{(1)}]^n. \quad (47)$$

Kezdetben legyen a gyök az  $i$ -ik helyen. Annak a valószínűsége, hogy  $n$  lépés után a  $j$ -ik helyen lesz található a gyök:

$$P_{ij}^{(n)} = N^{-1} \sum [1 - 4p \sin^2 \pi \frac{\pi k}{N}] \cos \frac{2\pi k(i-j)}{N}. \quad (48)$$

Definiáljunk egy arányossági tényezőt:

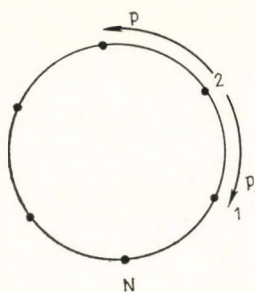
$$K = \frac{P}{\Delta t} \quad (49)$$

ahol  $\Delta t$  egy lépés ideje. Így  $t = n \cdot \Delta t$ . Képezve a  $\Delta t \rightarrow 0$  határátmenetet:

$$P_{ij}(t) = N^{-1} \sum \exp\left(\frac{-t}{\tau_k}\right) \cos \frac{2\pi k(i-j)}{N} \quad (50)$$

ahol

$$\tau^{-1} = 4K \sin^2 \frac{\pi k}{N}. \quad (51)$$



14. ábra

Ennek a kifejezésnek segítségével már könnyen képezhetjük a különböző korrelációs függvényeket. A közbenső korrelációs függvény:

$$I_S(\mathbf{Q}, t) = \langle \exp \{i\mathbf{Q}\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)\} \rangle = N^{-1} \sum_{j=1}^N P_{Nj}(t) \exp [i\mathbf{Q}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_N)]. \quad (52)$$

Az exponenst átírva polár koordinátákba, a szögek szerinti átlagolást elvégezve a következőt kapjuk a közbenső korrelációs függvényre:

$$I_S(\mathbf{Q}, t) = \frac{2\pi}{N} \sum_{l=1}^N \exp\left(-\frac{t}{\tau_k}\right) A_l(\mathbf{Q}), \quad (53)$$

ahol rendezetlen minta esetén:

$$A_l(\mathbf{Q}) = N^{-1} \sum_{k=1}^N j_0\left(2Qd \sin \frac{\pi k}{N}\right) \cos \frac{2\pi lk}{N} \quad (54)$$

rendezett mintánál:

$$A_l(\mathbf{Q}) = N^{-1} \sum_{k=1}^N J_0\left(2Qd \sin \frac{\pi k}{N} \sin \beta\right) \cos \frac{2\pi lk}{N} \quad (55)$$

$j_0(x)$  a szférikus,  $J_0(x)$  az egész indexű nulladrendű Bessel-függvény,  $\beta$  szög a  $\mathbf{Q}$  impulzusátadás és a direktor által bezárt szög. Ebből Fourier transzformációval kapjuk meg a szórásfüggvényt, melyet Barnes [10] számított ki először:

$$S(\mathbf{Q}, \omega) = A_N(\mathbf{Q}) \delta(\omega) + \frac{1}{\pi} \sum_{l=1}^{N-1} A_l(\mathbf{Q}) \frac{\tau_l}{1 + (\omega \tau_l)^2}. \quad (56)$$



Az elmozdulás négyzetes közepének átlaga:

$$\langle [\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)]^2 \rangle = 2d^2(1 - e^{-t/\tau_1}). \quad (57)$$

Az elfordulás korrelációs függvénye:

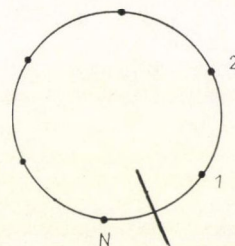
$$\langle \Omega(t) \Omega(0) \rangle = e^{-t/\tau_1}. \quad (58)$$

#### 4. Reflektálófalas egytengelyű rotátor

Az előző modellhez hasonlóan végezzon egy részecske stohasztikus bolyongást egy körön  $N$  pont között.

Két pont közé helyezzünk egy reflektáló falat, mely visszaveri az ott áthaladni akaró részecskét. A mozgást a

$$P^{(1)} = \begin{bmatrix} 1-p & p & \dots & 0 \\ p & 1-2p & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot \\ \cdot & & & p \\ 0 & \dots & p & 1-p \end{bmatrix} \quad (59)$$



15. ábra

mátrix segítségével lehet leírni. A mátrix spektrálfelbontását könnyen elő lehet állítani Hermite-polinomok segítségével [25].

A spektrálfelbontás:

$$P_{ij} = \frac{1}{N} \left\{ \sum_{k=1}^{N-1} 2 \left[ 1 - 4p \sin^2 \frac{\pi k}{2N} \right] \cos \frac{(2i-1)k\pi}{2N} \cos \frac{(2k-1)j\pi}{2N} + 1 \right\}. \quad (60)$$

Az előző modellhez hasonlóan definiáljunk három mennyiséget:

$$K = \frac{P}{\Delta t}; \quad n = \frac{t}{\Delta t}; \quad \tau_k^{-1} = 4K \sin^2 \left( \frac{\pi k}{2N} \right). \quad (61)$$

Képezzük a  $\Delta t \rightarrow 0$  határátmenetet az  $e = 2,71 \dots$  szám sorát kapjuk:

$$P_{ij}(t) = N^{-1} \left[ \sum_{k=1}^{N-1} \exp \left( -\frac{t}{\tau_k} \right) 2 \cos \frac{(2i-1)k\pi}{2N} \cos \frac{(2k-1)j\pi}{2N} + 1 \right]. \quad (62)$$

E képlet segítségével felírhatjuk a közbenső korrelációs függvényt:

$$I_S(\mathbf{Q}, t) = N^{-1} \sum_{j=1}^N P_{Nj}(t) \exp [i\mathbf{Q}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_N)]. \quad (63)$$

Az átlagolásokat és a Fourier-transzformációt elvégezve kapjuk meg a szórásfüggvényt:

$$S(\mathbf{Q}, \omega) = A_N(Q) \delta(\omega) + \frac{1}{\pi} \sum_{l=1}^{N-1} A_l(Q) \frac{\tau_l}{1 + (\omega \tau_l)^2}, \quad (64)$$

ahol izotrop minta esetén:

$$A_l(Q) = N^{-1} \sum_{k=1}^N 2j_0 \left( 2Qd \sin \frac{\pi k}{N} \right) \cos \frac{(2N-1)k\pi}{2N} \cos \frac{(2k-1)l\pi}{2N}, \quad (65)$$

$$A_N(Q) = N^{-1} \sum_{k=1}^N j_0 \left( 2Qd \sin \frac{\pi k}{N} \right),$$

rendezett minta esetén:

$$A_l(Q) = N^{-1} \sum_{k=1}^N 2J_0 \left( 2Qd \sin \frac{\pi k}{N} \sin \beta \right) \cos \frac{(2N-1)k\pi}{2N} \cos \frac{(2k-1)l\pi}{2N}, \quad (66)$$

$$A_N(Q) = N^{-1} \sum_{k=1}^N J_0 \left( 2Qd \sin \frac{\pi k}{N} \sin \beta \right).$$

### 5. Bolyongás gömbfelületen

Legyen a földgömb szélességi köreihez hasonlóan  $M$  darab kör egy gömbfelületen [26]. Az egyes körökön az előző modellhez hasonlóan  $N$  darab pont. Megengedjük az egyes körökön és a körök között a végtelen bolyongást. Az egyes köröket jellemezzük a

$$\vartheta_l = \frac{\pi \left( l + \frac{1}{2} \right)}{M} \quad 0 \leq l \leq M-1 \quad (67)$$

szögekkel.

Az előző modellhez hasonlóan a probléma matematikai interpretálása kvázi-diagonális hipermátrixszal történik. Annak a valószínűsége, hogy a  $\mu$  kör  $i$ -dik helyéről a  $\nu$ -ik kör  $j$ -ik helyre ugrik:

$$P_{ij}^{\mu\nu}(t) = \frac{1}{NM} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{M-1} \cos \frac{2\pi k(i-j)}{N} \cos \frac{2\pi l(\mu-\nu)}{M} e^{-\frac{t}{\tau_{kl}}}, \quad (68)$$

ahol

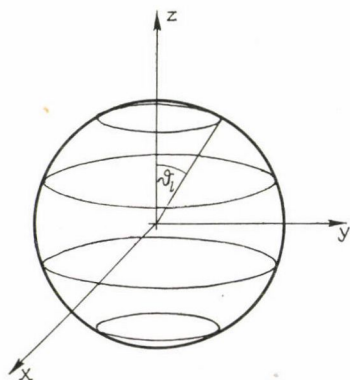
$$\tau_{kl}^{-1} = 4K_1 \sin^2 \frac{\pi k}{N} + 4K_2 \sin^2 \frac{\pi l}{M}. \quad (69)$$

$K_1, K_2$  két arányossági tényező. Annak a valószínűsége, hogy egy körön az egyik pontból a szomszédos pontba ugrik  $\Delta t$  idő alatt:

$$p_1 = K_1 \cdot \Delta t \quad (70)$$

$K_2$ -t hasonló módon definiáljuk, csak ennél a körök közötti ugrás valószínűségét kell figyelembe venni. Jelöljük  $\beta$ -val az impulzusátadás  $Q$  és a direktor által közbezárt szöget. Legyen

$$\begin{aligned} q_{\parallel} &= 2 \cdot Q \cdot d \cdot \cos \beta \\ q_{\perp} &= 2 \cdot Q \cdot d \cdot \sin \beta. \end{aligned} \quad (71)$$



16. ábra



A közbenső korrelációs függvény:

$$I(\mathbf{Q}, t) = \langle \exp [i\mathbf{Q}(\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0))] \rangle. \quad (72)$$

Az exponenst átírva gömbi koordinátákra, a számításokat és a Fourier-transzformációt elvégezve kapjuk meg a szórásfüggvényt:

$$S(\mathbf{Q}, \omega) = \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{r=0}^{M-1} L_{kr}(\omega) B_{kr}, \quad (73)$$

ahol

$$L_{kr}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\tau_{kr}}{1 + (\omega\tau_{kr})^2} \quad (74)$$

Lorentz-típusú függvények.

$$B_{kr} = \frac{1}{NM} \sum_{l=0}^{M-1} P(\vartheta_l) \sum_{j=0}^{N-1} \cos \frac{2\pi kj}{N} \sum_{l'=0}^{M-1} J_0(q_{\perp} d_{ll'}^j) \cos \frac{2\pi r(l-l')}{M} \cos \left[ q_{\parallel} \sin \frac{\pi(l+l'+1)}{2M} \sin \frac{\pi(l-l')}{2M} \right], \quad (75)$$

ahol

$$d_{ll'}^j = \left[ \sin^2 \frac{\pi(l-l')}{2M} \cos^2 \frac{\pi(l+l'+1)}{2M} + \sin \frac{\pi(l+1/2)}{M} \sin \frac{\pi(l'+1/2)}{M} \sin^2 \frac{\pi j}{N} \right] \quad (76)$$

$P(\vartheta_2)$  a Maier—Saupe-eloszlásfüggvény,  $J_0(x)$  a Bessel-függvény.

## VI. FEJEZET

### 1. A PAA molekulára végzett mérések kiértékelése

Az elmúlt néhány évben több kutatóhelyen vizsgálták a PAA folyadékkristályt kvázi-rugalmas neutronszerzés segítségével [27, 28]. A bemenőspektrum folyadékkristályos állapotban való kiszélesedését translációs diffúzióval próbálták magyarázni.

*Blinc* és *Dimic* mérései [27] szerint nematikus fázisban a translációs diffúziós konstans:

$$D_{tr} = (7,5 \pm 5) \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}.$$

Ebben a fázisban a konstans hőmérséklettől független volt.

*Otnes* és munkatársai [28] mágneses térrel orientált mintát használtak, míg az előző kísérletnél nem orientálták a mintát. Az anizotrópia miatt a diffúziós konstans egy mátrix, mégpedig diagonális mátrix (V. 1. modell).  $D_{\perp} = 1,2 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $D_{\parallel} = 2,0 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$  körüli értéket adott. Szerintük egy kissé függött a hőmérséklettől.  $D_{\perp}$  növekedett,  $D_{\parallel}$  csökkent a hőmérséklet növelése esetén nematikus fázisban.



Yun és Fredrickson [29]  $^{14}\text{C}$ -es nyomjelzős technikával mérték a PAA translációs diffúziós konstansát.  $122^\circ\text{C}$ -on nematikus fázisban  $D = (3,4 \pm 0,1) \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$  értéket kapták.

Ezen mérések között jelentős a diszkrepancia. Nagyságrend-különbség is adódott a különböző módszerekkel mért  $D_{\text{tr}}$  között.

Ezen eredmények ismeretében vizsgálták Töpler és munkatársai [30] kvázi-elasztikus neutronszórással a PAA translációs mozgását. A neutron-spektrométerüknél az impulzusátadás  $Q$  relatíve kicsi  $Q < 0,3 \text{ \AA}^{-1}$  volt. Ez az érték sokkal kisebb, mint a [27, 28] méréseknél használt. Méréseik szerint a PAA translációs diffúziós konstansa  $(4,1 \pm 0,3) \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$  ami jó egyezést mutat a nyomjelzős technikával mért eredménnyel.

Az előző neutronszórással végzett kísérleti eredmények és az utóbbi közötti különbség az első két mérés hibás interpretálásából adódik. A nagyobb  $Q$ -val végzett kísérletek esetében nem a translációs mozgást észlelték, hanem valamilyen rotációs diffúziót.

NMR-rel végzett mérések szerint (21) a PAA molekula végén levő metilcsoport forgása már jóval a folyadékkristály fázis alatti hőmérsékleten beindul.

A mi kvázi-rugalmas neutronszórással végzett kísérleteink szerint [31, 32]  $Q \sim 1 \text{ \AA}^{-1}$  szilárd fázisban gyakorlatilag egyforma volt a bemenő spektrum és a kilövő spektrum. Így a metilcsoport forgása nem okozhatja folyadékkristályos állapotban a kiszélesedést, mert ez már szilárd fázisban is forog. A metilforgás a mi általunk könnyen észlelhető forgásoknál több nagyságrenddel gyorsabb mozgás és így elveszik a háttérben az általa okozott effektus. A translációs diffúziós konstans a felsorolt mérések alapján  $D = 4 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ . Ez a mi méréseinkben nem egészen 1 csatornányi kiszélesedést okoz. A valóságban ennél egy nagyságrenddel nagyobb a kiszélesedés folyadékkristályos állapotban.

Ezért egy más jellegű modellt választottunk a mozgás leírására, a folytonos szférikus rotációs modellt (V. 2.). A modell merevnek tekinti a pálcika alakú molekulákat, melyek folytonos térbeli forgást végeznek. Számítógéppel modelleztük a mozgást. A képletekben két szabad paraméter volt:  $D_r$  és  $Qd$ .  $D_r$ -nek  $1,2 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$  körüli értéket vártunk. Ezért  $0,6 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$  és  $2 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$  között számoltuk ki a modellt  $0,2 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$ -enként. A  $Q \approx 1 \text{ \AA}^{-1}$  körüli érték, ezért  $(Qd)$ -t (2, 7) intervallumban számoltuk. A FOCAL nyelven írt programot TPA—1001 típusú számítógépen futtattuk. Ez a program maximálisan igénybe vette a számítógép teljesítőképességét.

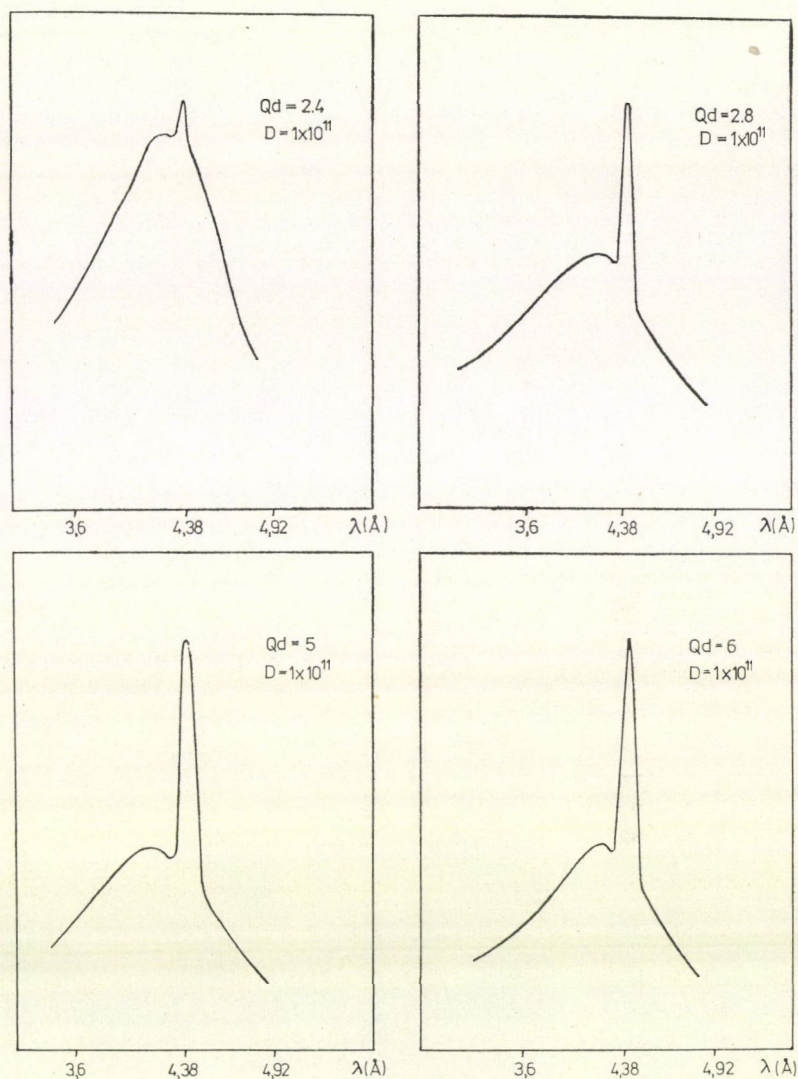
A számolt (17. ábra) és mért értékek alapvetően különböztek egymástól. Így arra a következtetésre jutottunk, hogy ez a modell nem írja le jól a molekula mozgását. Ennek valószínű oka az, hogy ezt a nagy helyigényű mozgást a molekulák helyhiánya miatt nem tudják végezni. A molekulák szorosan helyezkednek el egymás mellett, nem tudnak szabadon forogni.

Ezért megpróbálkoztunk egy olyan modellel, melyben a mozgás nem folytonos, hanem bizonyos helyek között véletlenszerűen megy végbe. Ezt a modellt, az ún. egytengelyű rotátor diffúzióját Barnes számolta ki a stohasztikus bolyongás alapján (V. 3.).

A modellben két szabad paraméter szerepel:  $K$  és  $(Qd)$ . Ezt a modellt a KFKI ICT számítógépen számoltuk ki.

Számoltuk a kétszer differenciális hatáskeresztmetszetet és annak félérték szélességét. Jó egyezést kaptunk a számolt és mért értékek között mindkét függvény esetében. A négyszögben mért és a hozzá tartozó számolt, kétszer differenciális hatáske-





17. ábra. A folytonos rotációs modellel számolt kétszer differenciális hatáskeresztmetszet

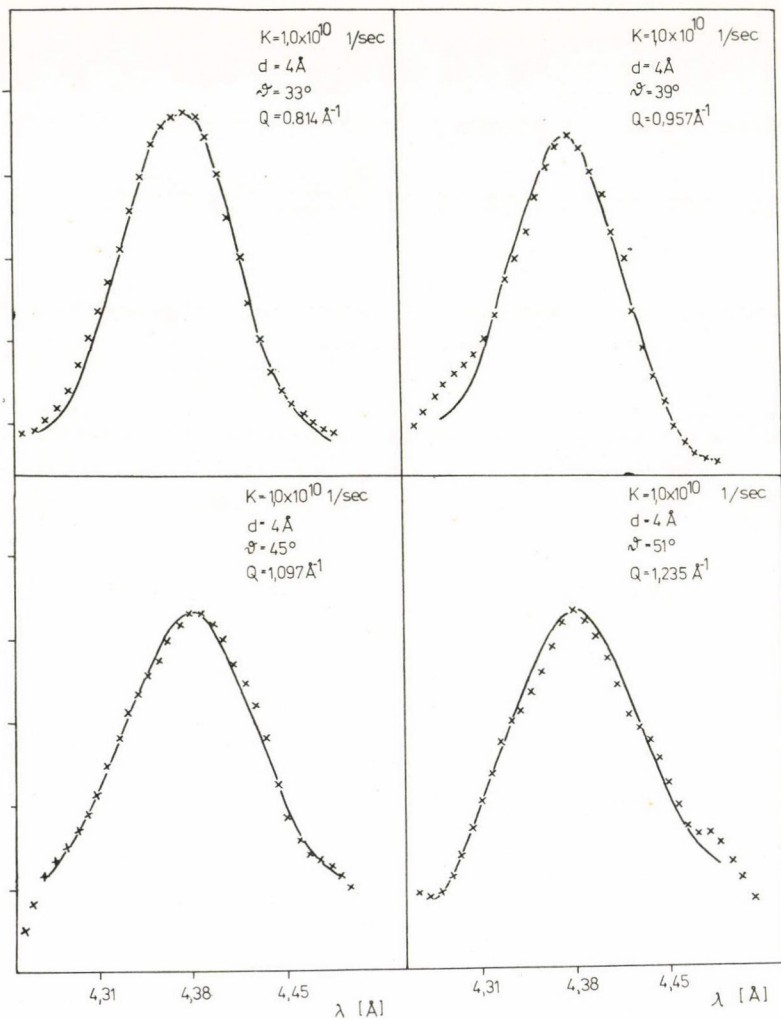
resztmetszet a 18. ábrán látható. A két szabad paraméter értékére a következőket kaptuk:

$$K = 1,0 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}$$

$$d = 4 \text{ Å}.$$

A számolásnál  $N=8$  különböző helyzet között végzett végtelen bolyongást a molekula.

Ezen eredmények alapján a PAA molekulatörzs mozgása egy translációs és egy gátolt rotációs diffúziójából tevődik össze folyadékkristályos fázisban. Ezenkívül a metilcsoport is forog. Ez a mozgás az NMR mérések szerint [21] már szilárd fázisban,  $-150^\circ\text{C}$ -on beindul és a különböző módszerrel végzett mérések, illetve számítások szerint a barrier: 3,51; 3,7; 3,85; 4,2  $\text{kcal mol}^{-1}$  [21, 22]. A PAA nematikus fázis hőmérsékletén az egy szabadsági fokra jutó energia fél  $\text{kcal mol}^{-1}$  körüli érték az ekvipartíció tétele szerint. Így a  $\text{CH}_3$  csoport forgása esetében jelentős szerepet játszik az alagútjelenség [38]. MNR mérések szerint, az Arrhenius-törvényből származtatható relaxációs idő  $10^{-12}$  s körüli érték [21]. Hasonló eredményre jutott egy



18. ábra. A sztohasztikus bolyongás alapján számolt — és a PAA  $122^\circ\text{C}$ -on nematikus fázisban mért  $\times$  kétszer differenciális neutron szórási hatáskeresztmetszete



francia kutatócsoport [22], ők neutronszórással vizsgálták a metilcsoport forgását, ez az érték két nagyságrenddel kisebb, mint az általunk számolt modellből származtatható relaxációs idő  $\tau$ . A mi méréseinknél a metilcsoport relatíve gyors mozgásából eredő szórási effektus elmosódik a háttérben. Így az általunk mért effektust a molekulatörzs mozgásával lehet azonosítani. Hasonló következtetés szűrhető le a dielektromos állandó méréseiből [34]. A molekulatörzs mozgásának relaxációs idejére nagyságrendileg egyező eredményt kaptunk.

A kvantumkéimiai számítások szerint a molekulatörzs a mozgás során merevnek tekinthető. Így az adódott, hogy nematikus fázisban, nem orientált PAA folyadék-kristály-molekula protonjainak legvalószínűbb mozgása véletlen bolyongás 8 pont között, átlagosan a nematikus tengely körül  $4 \text{ \AA}$  sugarú körpályán. E mozgástól függetlenül mozog a metilcsoport, és a molekula translációs diffúziós mozgást végez.

## 2. A DB—PBB molekulára végzett mérések kiértékelése

Ez a három benzolgyűrűt tartalmazó molekulákból álló anyag  $85^\circ\text{C}$ — $183^\circ\text{C}$  hőmérsékleti intervallumban mutat nematikus folyadékkristályos állapotot. A molekula két végén egy-egy butilcsoport található. Az irodalomban nem talákoztunk ennek az anyagnak ilyen jellegű vizsgálatával. Magmáneses rezonanciás módszerrel Pócsik I. mérte ezt az anyagot [40].

A DB—PBB pozitív dielektromos anizotrópiával bír, így elektromos tér segítségével könnyen lehet rendezni az anyagmintát. A DB—PBB molekula szerkezete a PAA-énál több lehetőséget enged meg a belső mozgásoknak. A végeken található butil-, propil-, etil-, metilcsoport külön-külön egymástól függetlenül foroghat. Az eddigi ismereteink szerint a benzolgyűrűk egymáshoz képest nem valószínű, hogy mozognak. A belső mozgásokon kívül a molekulatörzs is mozoghat. A translációs diffúziós mozgástól a PAA vizsgálatánál már leírt okok miatt eltekintettünk. Első lépésként, már a PAA-nál jól bevált Barnes-modellt választottuk. Ez a modell az egytengelyű rotátor rotációs diffúzióját írja le stohasztikus bolyongás alapján. Számítógéppel a modell alapján számoltuk a kétszer differenciális hatáskeresztmetszetet és a modellben szereplő paraméterek változtatásával illesztettük a mért értékekre.

Rendelkezésünkre állt három hőmérsékleti értéken, négy-négy szórási szögben mért spektrum. A 19-ik ábrán látható a rendezett mintán mért és a számolt kétszer differenciális szórási hatáskeresztmetszet.

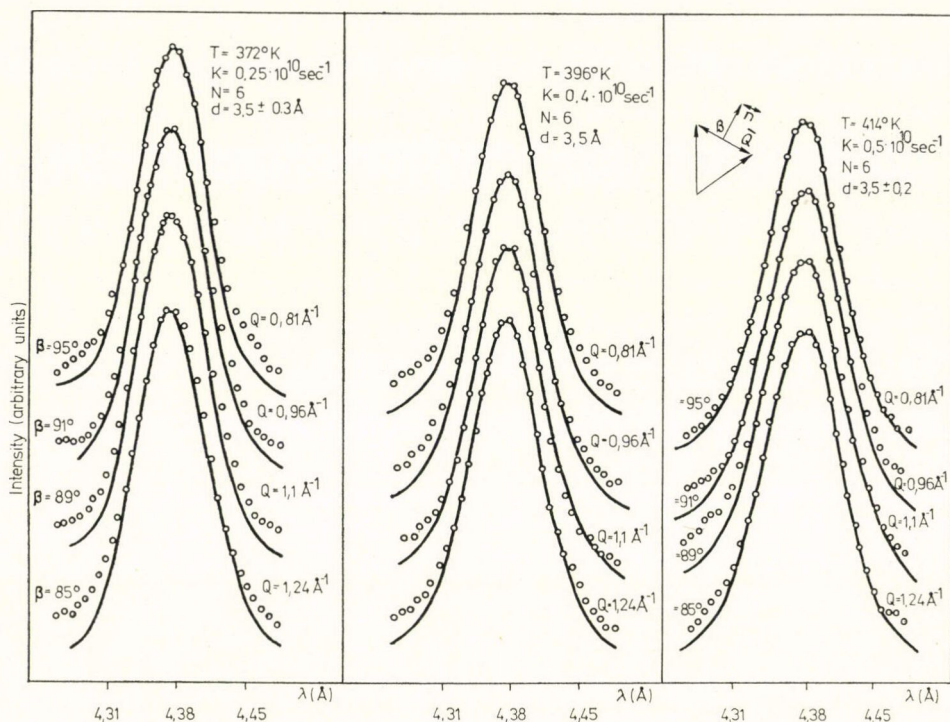
A modellben szereplő paraméterekre a következő értékeket kaptuk:

Hőmérséklet K	$K$ $\text{s}^{-1}$	$d$ $\text{\AA}$	$N$	$\tau$ s
372	$0,25 \cdot 10^{10}$	3,5	6	$2 \cdot 10^{-10}$
396	$0,4 \cdot 10^{10}$	3,5	6	$1,25 \cdot 10^{-10}$
414	$0,5 \cdot 10^{10}$	3,5	6	$1 \cdot 10^{-10}$

$\tau$  a modellből származtatható relaxációs idő.

A mért és számolt görbék közötti egyezés nem volt kielégítő. Így a modellben feltételezett mozgáson kívül valamilyen más mozgást is „látunk” az általunk használt neutron energián.





19. ábra. Rendezett DB—PBB anyagmintán mért  $\circ$  és a Barnes-modell alapján számolt — kétszer differenciális neutronszerési hatáskeresztmetszet

Két lehetséges eset van: vagy a molekula két végén levő csoport mozog, vagy a molekulatörzs végez valamilyen összetettebb mozgást. Vizsgáljuk az első esetet. A kvantumkémiai közelítő számításokból rendelkezésünkre áll a különböző csoportok rotációs barrierje.

A metilcsoport PCILO módszerrel számított rotációs barrierje  $V_3 = 2,45$  kcal mol<sup>-1</sup>. Ez az érték kisebb mint a PAA esetén volt. Így valószínű, hogy a metilcsoport egy 10<sup>12</sup> s relaxációs idővel forog, ami két nagyságrenddel gyorsabb az általunk mérhető mozgásnál. Így ez az effektus eltűnik a mérés során a háttérben. Az NMR mérések szerint a metilcsoportnál nagyobb rész, a propil- vagy az etilcsoport mozog. A kvantumkémiai számítások szerint az etil- és propilcsoport barrierje egy háromfogású potenciál, mely két egyező és egy nagyobb maximummal rendelkezik (11, 12 ábra). Egy modellt dolgoztunk ki, melyben ez a nagyobb potenciálgát úgy szerepel, mint egy végtelen magas csúcs, vagyis egy visszaverő fal (V. 4. modell).

A szokásos módon számítógéppel számoltuk a kétszer differenciális szerési hatáskeresztmetszetet.

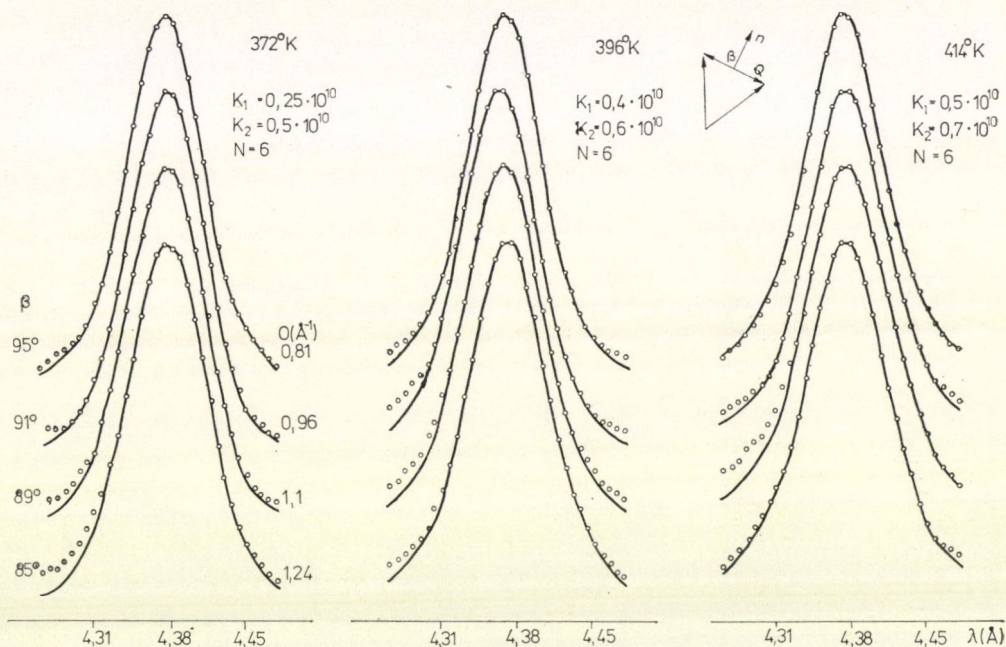
Mivel a potenciáloknak három minimumuk van, ezért a modellben szereplő  $N=3$ . A karakterisztikus távolságadatnak a forgási tengelytől számított hidrogén átlagtávolságot választottuk. Nem kaptunk jó egyezést a számolt és mért görbék kö-



zött. A propilcsoport forgása nagy helyigényű így ez a mozgás nem valószínű. Hasonló ok miatt és az NMR mérés alapján a butilcsoport forgását is elvetettük.

Ezért a második lehetőséggel foglalkoztunk. A molekulatörzs mozgását a „bolyongás gömbfelületen” modellel írtuk le (V. 5.). Ez a modell kétfajta mozgást ír le. Egyrészt a nematikus irány körüli körmozgást, másrészt a molekula rövid tengelye körüli forgást.

Ezt a két különböző mozgást  $K_1$ ;  $K_2$  arányossági tényezővel írjuk le. A modell figyelembe veszi a Maier—Saupe-eloszlási függvényt is. A modellben szereplő gömb-sugárnak a molekula tömegközépponttól számított átlag hidrogéntávolságot választottuk. Számítógéppel számoltuk a kétszer differenciális hatáskeresztmetszetet. A számított görbék és a mért pontok a 20. ábrán láthatók.



20. ábra. Három hőmérsékleten, rendezett DB—PBB anyagmintán mért  $\circ$  és a bolyongás gömbfelületen modellel számolt — kétszer differenciális neutron szórás hatáskeresztmetszet

Evvel a modellel kaptuk a legjobb egyezést a mért és számolt hatáskeresztmetszetek esetében. A modellben szereplő paraméterekre a következő értékek adódtak:

Hőmérséklet K	$K_1$ $s^{-1}$	$K_2$ $s^{-1}$	d Å	N	s	s
372	$0,25 \cdot 10^{10}$	$0,5 \cdot 10^{10}$	8,8	6	$2 \cdot 10^{-10}$	$10^{-10}$
396	$0,4 \cdot 10^{10}$	$0,6 \cdot 10^{10}$	8,8	6	$1,25 \cdot 10^{-10}$	$8,3 \cdot 10^{-11}$
414	$0,5 \cdot 10^{10}$	$0,7 \cdot 10^{10}$	8,8	6	$10^{-10}$	$7,1 \cdot 10^{-11}$



Ezek alapján jónak tűnik a feltevés, miszerint a molekulatörzs mozgását két különböző relaxációs folyamat írja le közel egyező relaxációs idővel. Ez az eredmény [41] egyezik a dielektromos-állandó mérésekkel.

Ezenkívül a molekula végez translációs diffúziós mozgást, és a végeken minden valószínűség szerint a metilcsoport rotációs diffúziós mozgást végez. Ez utóbbi mozgás leválasztására lehetőség van, mégpedig oly módon, hogy a butilcsoportokat lecseréljük klórra. Az így létrejött anyag 146 °C—240 °C hőmérsékleti tartományban mutat nematikus fázist. Ez által lehetőség adódik a molekulatörzs mozgásának vizsgálatára folyadékkristályos állapotban. E mérések jelenleg a KFKI-ban folynak.

#### A DOLGOZAT TÉMÁJÁBÓL EDDIG MEGJELENT PUBLIKÁCIÓK:

- L. Bata, I. Vizi, S. Kugler* KFKI Preprint 74—75, 1975.  
*L. Bata, I. Vizi, S. Kugler* Solid State Comm. 18, 55, 1976.  
*I. Pócsik, K. Tompa, J. Lasanda, S. Kugler, G. Náray-Szabó* KFKI Preprint 1977—40.

#### Köszönetnyilvánítás

A szerző köszönetét szeretné kifejezni:

- Kónya Albert* akadémikusnak és *Króó Norbert*nek a fizikai tudományok doktorának, hogy lehetővé tették számára a jelen értekezés elkészítését.  
*Bata Lajos* kandidátusnak a számítógépes modellezés során nyújtott irányító tevékenységéért.  
*Vizi Imréné*nek a neutronszórási kísérletek elvégzéséért.  
*Náray-Szabó Gábornak* az értékes szakmai és technikai segítségért, mely alapján lehetőség nyílt a kvantumkémiail közelítő módszerekkel számításokat végezni.  
*Kocsis Istvánné*nek a gépelési munkák elvégzéséért.

#### IRODALOM

1. *F. Reinitzer* Wiener Monatsch. Chem. 9, 421, 1888.
2. *V. Maier, A. Saupe* Z. Naturforschung 13A, 564, 1958; 14A, 882, 1959; 15A, 287, 1960.
3. *L. Van Hove* Phys. Rev. 95, 249, 1954.
4. *P. Schofield* Phys. Rev. Lett. 4, 239, 1960.
5. *G. H. Vineyard* Phys. Rev. 110, 999, 1958.
6. *K. Rosciszewski* Acta Phys. Pol. A41, 549, 1972.
7. *V. F. Sears* Can. J. Phys. 44, 1299, 1966.
8. *P. A. Egelstaff* J. Chem. Phys. 53, 2590, 1970.
9. *I. G. Kemény, J. L. Snell, G. L. Thompson* Modern matematika alapjai. Műsz. K. Bp. 1971.
10. *J. D. Barnes* J. Chem. Phys. 58, 5193, 1973; *L. Bata, I. Vizi* KFKI Preprint 73—60.
11. *A. J. Mogilner, O. A. Szalnyikov, L. A. Timohin* Priboři i Tehnika Eksperimentov. 2, 22—27, 1965.
12. *S. Diner, J. P. Malrieu, F. Jordan, M. Gilbert* Theoret. Chim. Acta. 15, 100, 1969.
13. 220. sz. program a QCPE-nél.
14. *A. Pullman* Topics in Current Chemistry. 31, 45, 1972.
15. *J. A. Pople, D. L. Beveridge*: Approximate Molecular Orbital Theory. McGraw Hill, New-York, 1970.
16. *S. Weiss, G. E. Leroi* J. Chem. Phys. 48, 962, 1968.
17. *H. Fischer, H. Kollmar* Theoret. Chim. Acta. 13, 213, 1969.
18. *J. A. Pople, G. A. Segal* J. Chem. Phys. 43, S136, 1965.
19. *K. Ösapay, G. Náray-Szabó* Adv. Mol. Rel. (megjelenés alatt)
20. *W. R. Krigbaum, Y. Chatami, P. G. Barber* Acta Cryst. B26, 97, 1970.
21. *I. Pócsik, K. Tompa, J. Lasanda, S. Kugler, G. Náray-Szabó* KFKI Preprint 1977—40.
22. *H. Hervet, A. J. Dianoux, R. E. Lechner, F. J. Volino* Physique, 37, 587, 1976.
23. *L. Bata, V. L. Bronde, V. G. Fedotov, N. Kroó, L. Rosta, J. Szabon, L. M. Umarov, I. Vizi* KFKI Preprint 1976—42.



24. C. Sieiro, P. Gonzalez-Díaz, Y. G. Smeyers J. Mol. Struct. 24, 345, 1975.
25. P. Rózsa Lineáris algebra és alkalmazásai. Műszaki Kiadó, Budapest, 1974.
26. L. Bata, I. Túttö Mol. Cryst. Liq. Cryst. 38, 163, 1977.
27. R. Blind, V. Dimic Phys. Lett. 31A, 531, 1970.
28. K. Otner, R. Pynn, J. A. Janic, J. M. Janic Phys. Lett. 38A, 335, 1972.
29. C. K. Yun, A. G. Fredrickson J. Mol. Cryst. and Liq. Cryst. 12, 73, 1970.
30. J. Töpler, B. Alefeld; T. Springer Mol. Cryst. Liq. Cryst. 26, 297, 1974.
31. L. Bata, I. Vizi, S. Kugler KFKI Preprint 1974—75.
32. L. Bata, I. Vizi, S. Kugler Solid State Comm. 18, 55, 1976.
33. A. J. Dianoux, F. Volino, H. Hervet Mol. Phys. 30, 1181, 1975.
34. A. Martin, G. Meier, A. Saupe Faraday Symp. No. 5. 327—10—11, 1971.
35. L. Bata, I. Vizi Phys. Lett. 56A, 92, 1976.
36. S. Chandrasekhar Rep. Progr. Phys. 39, 613, 1976.
37. P. G. De Gennes The Physics of Liquid Crystals. 1974, Clarendon Press, p. 34.
38. W. J. Orvill, Thomas Interval Rotation in Molecules. 1974, John Wiley.
39. L. Bata, I. Vizi, S. Kugler Előkészületben.
40. I. Pócsik Egyetemi doktori értekezés. ELTE 1976.
41. L. Bata Á. Buka, G. Molnár Mol. Cryst. Liq. Cryst. 38, 155, 1977.





# KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

## A TWISTOR-ELMÉLET CÉLJAI ÉS EREDMÉNYEI\*

ROGER PENROSE

### 1. Bevezetés

A mai fizikában két — egymástól látszólag független — hely van, ahol a kontinuum-fogalom játszik alapvető szerepet. Az egyik a négydimenziós valós kontinuum, az a téridő, ahol — feltevésünk szerint — a világ jelenségei lefolynak. Ugyanennek a kontinuumnak másik megjelenési formája az energiáimpulzus-négyesvektorok tere. A másik előfordulás a kvantummechanika komplex kontinuum, amiből a valószínűségi amplitúdó fogalma és a szuperpozíció törvénye ered, ezek pedig a jelenségek leírására alkalmas komplex Hilbert-térhez vezetnek. Ezt a két kontinuumot, melyek egyike lényegét tekintve valós, a másik pedig komplex, egymástól teljesen függetlennek szokták tekinteni. Semmi ok nem látszik arra, hogy a kvantummechanikát miért ne alkalmazhatnánk olyan képzelt téridőkben, amelyek dimenziójukat vagy szignatúrájukat tekintve különböznek a mi téridőnkől — és valójában gyakran alkalmazzák is! A kvantummechanika elgondolásait egyszerűen rátelepítik a négydimenziós téridő klasszikus képére és — úgy tűnik — bármelyik kontinuum létezhetett volna a másik nélkül. Ebből a szempontból nézve, természetesen nem szükséges, hogy az a téridő, amelyben élni látszunk, dimenzióját vagy előjelezését tekintve kiüntetett legyen.

A twistorelmélet egyik alapgondolata az, hogy a fizika számára olyan új keretet adjon, amelyben — kiinduláskor — a két kontinuum egybeolvad. A komplex kvantummechanikai kontinuum szétválaszthatatlanul beleszővődik a geometriába. A téridő dimenziója és előjelezése itt szükségképpen rögzített; a twistorokat nem lehetne alkalmazni, ha ezek az értékek nem volnának éppen a fizikai világegyetemben megfigyeltek. A twistorelmélet tehát a fizikában levő egymástól különböző kontinuumfogalmak számát kettőről egyre csökkenteni. De a twistorelmélet távolabbi célja az, hogy a kontinuum-fogalom az elméleti fizika alapjából végül teljesen kiküszöbölhető lehessen. Ebben az esetben a természeti jelenségek leírása a számlálásra vagy más kombinatorikai eljárásra épülne.

A nem-relativisztikus kvantummechanikai spin [1] [2] legelemibb vizsgálataiban is kölcsönös kapcsolat léte érezhető a kvantummechanika komplex számai és a térszerkezete között. Egy  $1/2$  spinű részecske spinállapotai a két („spin $\uparrow$ ” és „spin $\downarrow$ ”) állapot komplex lineárkombinációi. De a  $\uparrow$  és  $\downarrow$  irányok nem kitüntetettek. Ugyanúgy „bal” és „jobb” vagy „előre” és „hátra” szavakkal is jelölhetnénk őket. Ezeket a választási lehetőségeket ezért elő kell tudnunk állítani az első kettő lineáris kombinációjaként. De ha a háromdimenziós térben az irányok teljes készletét akarjuk meg-

\* Quantum Gravity. An Oxford symposium. (Ed. C. J. Isham, R. Penrose & D. W. Sciama, Clarendon Press, (1975) 268.)



kapni, akkor a két eredeti állapot *komplex* kombinációira van szükség. Bonyolultabbá válik a helyzet természetesen, ha magasabb spinű rendszereket vizsgálunk. De világosan látható, hogy a tér háromdimenziós volta és a komplex számoknak, mint valószínűségi amplitúdóknak kényszerű használata között bensőséges kapcsolat áll fenn. Ez a kapcsolat — matematikailag pontosabb módon — az

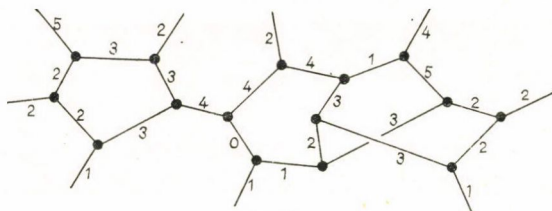
$$\text{SU}(2) \rightarrow \text{SO}(3) \quad (1.1)$$

lokális izoformizmussal fejeződik ki (ez pedig nem más, mint egy  $(2-1)$  leképezés, l. a [3] irodalmi utalás).

Az  $\text{SO}(3)$  reprezentációkat az  $\text{SU}(2)$  reprezentációkként játszott szerepükön tanulmányozhatjuk legjobban. Egyebek között ez a tény húzódik meg a *spinhálózatok* [2] elméletének alapját képező kombinatorikai szabályok mögött. Úgy érzem, érdemes röviden kitérni a spinhálózatok elméletének tárgyalására, a spinhálózatok ugyanis olyan modellt alkotnak, amelynek tulajdonságai beépíthetők a twistorelméletbe. Részletesebb kifejtését a [2] és [5] irodalmi hivatkozásokban találjuk, bár teljes tárgyalása még nincs publikálva.

A fizikai világot egy hálózatféle állítja elő; egy példát láthatunk erre az 1. ábrán.

Az egyes vonalszakaszokról feltesszük, hogy jóldefiniált  $n/2$  teljes impulzusmomentumú objektumokat reprezentálnak ( $n=1$  esetén), ahol  $n$  (nem negatív) egész



1. ábra

szám vonalszakasz címkéje. A modell szerkezetét teljesen definiálja a kombinatorikai hálózat konfigurációja és az egész számok értéke. A jobb elképzelhetőség kedvéért a vonalszakaszokat lassan mozgó részecskék világvonalaként foghatjuk fel (de nem szükségképpen „elemi részecskék”-nek, vagy ehhez hasonlóan specifikus képződményeknek), az időt pedig a kép aljától a kép teteje felé terjedőnek vehetjük — de a számolást nem befolyásolja, hogy az idő mely irányát hogyan választottuk az ábrán. Ebben a stádiumban az idő és a tér valóban egyáltalában nem szerepel a szerkezetben. Az a szándékunk, hogy a diagramokra vonatkozó szabályokból *felépítsük* a fizikai tér fogalmát. Ezek a szabályok tisztán kombinatorikai természetűek és segítségükkel a különböző spinértékek valószínűsége kiszámítható, valahányszor a spinhálózathoz egy újabb külső vonalszakaszt csatolunk. (Ilyen ott illeszthető a hálózathoz, ahol két, előzőleg külső vonal találkozik.) Végül mindig kiderül, hogy ezek a valószínűségek racionális számok, amelyek a teljes hálózatok szerkezetétől és spin-értékeitől függenek és kiszámíthatók bizonyos egész számokból, amelyek *zárt* spinhálózatokra vonatkozó tisztán kombinatorikai megfontolások eredményei (zárt a spinhálózat, ha nincsenek szabad végei). Ezekkel a valószínűség-értékekkel felépíthető a fizikai geometriának egyfajta fogalma, ha feltesszük, hogy a spinhálózat *nagy* spinértékű szakaszai a térben „irányokat” definiálnak (amelyeket spintengelyekként jelenítünk meg), ezen



„irányok” közötti „szögeket” pedig a kombinatorikai úton kiszámolt valószínűség-értékekből vezetjük le. Feltéve, hogy a spinhálózatban levő „szögek” — megfelelő értelmezés szerint — közelítőleg „szigorúan definiáltak”, akkor olyan geometriát kapunk, amely (a közelítés fokának megfelelő mértékben) az euklideszi háromdimenziós tér irányainak geometriájával egyezik meg. Ha azonban némelyik „szög” nincs „szigorúan definiálva”, akkor egy csomó egyidejűleg fennálló, közelítő euklideszi háromdimenziós térhez jutunk, amelyek egyikének „szigorúan definiált” iránya — bizonyos értelemben — a másikkban levő irányok lineáris kombinációi. Az így kapott kép nagyon hasonlít a görbült téréhez, amelyben minden egyes lokális tartományból közelítő módon különböző inkompatibilis euklideszi geometriák erednek. (Részletesebb tárgyalását lásd az irodalomjegyzék [5] számmal jelzett dolgozatában.)

A spinhálózat-modellnek két különböző (de egymással kapcsolatban álló) fogyatékossága van, ha a tényleges fizikai világot akarjuk vele leírni: a szabályai ugyanis olyanok, hogy az impulzusmomentum nem-relativisztikus és ugyanakkor a spin nem keveredik a pályaimpulzusmomentummal. Az utóbbi hiányosságnak az a következménye, hogy a létrejövő geometriában csak irányok keletkeznek, nempedig térbeli elkülönülések; az előbbi tulajdonság miatt pedig az idő nem szerepel a geometriában. Mindkét fogyatékosság nyilvánvalóan orvosolható volna, ha a spinhálózatra vonatkozó kombinatorikai szabályok levezetésében  $SO(3)$ -t megpróbálnánk helyettesíteni a Poincaré-csoporttal. (Ha csak a Lorentz-csoportokat használnánk, akkor a spin-pálya keverést nem foglalnánk bele; ezért szükség van a translációkra is.) Ez azonban nem könnyű dolog. Több oka is van annak, hogy miért alkalmasabb csoportunkat mégis jobban — a konform csoportra — kiterjeszteni. Ekkor ugyanis a részecskékről feltesszük, hogy kezdetben zérus nyugalmi tömegük van; a nyugalmi tömeget tehát másodlagos fogalomnak tekintjük, ami a kölcsönhatások következtében lép fel (lásd a 3. §-t; és ezzel kapcsolatos véleményt a [6] irodalmi hivatkozásban). A helyi izoformizmus [3], [4]:

$$SU(2,2) \rightarrow C^{\dagger}_{+}(1,3) \quad (1.2)$$

(ami egy  $(4-1)$  leképezés) itt (1.1)-et helyettesíti, amelyben  $C(1,3)$  a (kompakttá tett) Minkowski-téridő 15 paraméteres konform csoportjának azonossággal összekötött komponensét jelenti. Az a tény, hogy  $SU(2)$  helyett  $SU(2,2)$ -t használunk, néhány döntően fontos különbséget von maga után. A legelső onnan ered, hogy  $SU(2,2)$  nem kompakt, így —  $SU(2)$ -vel ellentétben — végtelen dimenziójú irreducibilis reprezentációi vannak. Ezenkívül az  $SU(2,2)$ -nek végtelen dimenziójú reprezentációi érdekelnek bennünket különösen. Így egyáltalában nem világos, hogy a fenti program — még ha sikeresen végrehajtjuk is — lehetővé teszi, hogy a fizikai törvényeket néhány kombinatorikai szabályra redukáljuk.

Ennek ellenére a twistor-programot olyan próbálkozásnak is tekintjük, amely a spinhálózat-modellt a fentebb vázolt módon továbbfejleszti és amelynek alapjául az (1.2) izomorfizmus szolgál. A twistorelméletnek valóban egyik alapgondolata, hogy a téridő-pontok kezdetben nem jelennek meg az elméletben. A pontokról feltesszük, hogy leszármaztatott objektumok, a twistorok maguk az alapvetőek. Bár a twistor pontos meghatározását csak a 2. §-ban adjuk meg, pillanatnyilag úgy tekinthetjük, hogy egy twistor szabadon mozgó (klasszikus) tömegnélküli részecskét reprezentál. (A twistorok valójában nem fizikai részecskék, ezt csak a jobb elképzelhetőség céljából mondjuk így.) Ahhoz, hogy az  $R$  téridő-pontot rögzítsük, tekintjük az összes

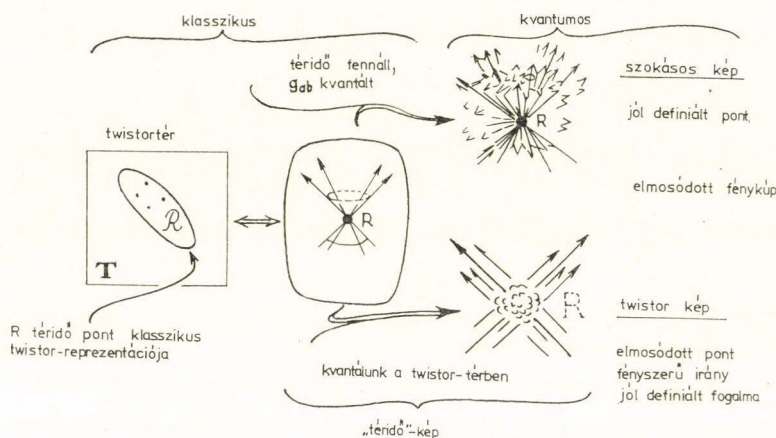


$R$ -en átmenő, zérus nyugalmi tömegű szabad mozgást. A téridő-kép nem más, mint az  $R$  teljes fénykúpjának a képe.

Ez a fénykúp a twistorok  $\mathcal{R}$  rendszerének felel meg és így a  $T$  twistortérben is van képünk, amelyben az eredeti  $R$  téridő-pontot a  $T$ -nek  $\mathcal{R}$  alhalmaza reprezentálja.

Ha a geometriai leírás klasszikus marad, ez a két kép tényleg megfelel egymásnak. De — ha bevezetjük a görbületet és a kvantummechanikát — a twistorokkal való leírás a kvantált téridő valószínű természetére vonatkozólag a szokásostól gyökeresen különböző látásmódra vezet. Az eddigi szokásos szemléletmódban a téridőt úgy képzeljük el, hogy benne a pontok változatlanok maradnak, de  $g_{ab}$  kvantált lesz. Így egy  $R$  ponthoz tartozó vektor térszerű, fényyszerű, vagy időszerű természetében kvantumos bizonytalanságok lépnek fel. A twistor-szemléletben fordított a helyzet. A twistorok téridőbeli „mozgásirányai”-nak szükségképpen zérusnak kell maradniuk; a twistorok téridőbeli átmetszései lesznek kvantumos bizonytalanságok. A twistor fogalma változatlan marad (így a  $T$  tér továbbra is fennáll), de a téridő-pont elmosódottá válik (lásd a 2. ábrát).

Ez a nézőpont összhangban van azzal a gondolattal (ami szintén része a twistor-filozófiának), hogy a spinorok alapvetőbb szerepet játszanak, mint a világvektorok, és hogy világunk  $(+ - - -)$  előjelezése valahogyan onnan ered, hogy a vele asszociált



2. ábra

spin-tér különösen egyszerű természetű [1], [7]. Ezen elgondolás szerint (1.1) relativisztikus általánosítása, vagyis az

$$SL(2, \mathbb{C}) \rightarrow O_+^*(1, 3) \quad (1.3)$$

lokális izoformizmus [3], [4] (ami tulajdonképpen  $(2-1)$  leképezés), a „mélyebb oka” a téridő dimenziójának és előjelezésének. A komplex kétdimenziós spin-vektorokat (amelyekre az  $SL(2, \mathbb{C})$  elemek hatnak Lorentz-transzformáció végrehajtásakor) kell elsődlegesen tekinteni. Minden világvektor és világ-tenzor tenzor-szorítások, -összeadások és komplex konjugációk segítségével spin-vektorokból épül fel. A spin-vektor téridőbeli interpretációja azonban valami olyasmi, ami a fénykúppal van összefüggésben (pontosabban: mint a kúpot érintő fény-zászló). Ha bizonytalan volna



az, hogy egy világ-vektor fényszerű-e vagy sem, akkor ennek a bizonytalanságnak tovább kellene terjednie egészen a spin-vektor fogalmáig. Nehéz átlátni, hogy egy spin-vektorral előállított objektum azonosságába hogyan jöhetnének be kvantumos bizonytalanságok, ha a fizikában — mint szemléletünk megkívánja — a spin-vektoroknak kell az alapvető szerepet játszaniuk. A téridő-pontok természetének twistor-szemlélete kínál kiutat. A kvantumos bizonytalanságot átvisszük magára a téridő-fogalomra.

Azt is kérdezhetné valaki, hogy a twistor-közelítésben miért helyezzünk olyan nagy bizalmat a fényszerű objektumokba (mint spin-vektorok, zérus nyugalmi részecskék és terek, konform invariancia). Végeredményben a természetben vannak tömeggel bíró részecskék (!) és a fizika úgy látszik konform módon nem invariáns. Elképzelhető volna, valóban egy olyan program is, amely kiindulását tekintve hasonlítana a twistor-programhoz, s amelyben a twistor-elmélet fényszerű geodetikus vonalainak szerepét időszerű geodetikus vonalak (vagy általában a geodetikus vonalak) vennék át (lásd a 8. sz. irodalmi hivatkozást). Ennek megfelelően a téridő-pontokat továbbra is leszámaztatott objektumoknak lehetne venni és a geodetikus teret tekintenénk elsődlegesnek. Az „elmosódott” pont fogalma itt is fenntartható. A spinhálózat-elmélet éppen olyan erősen motiválja ezt is, mint a twistor-elméletet. De bármilyen új közelítés értéke végső soron a részleteken fordul meg. A twistorformalizmus ereje néhány fontos matematikai tényben rejlik, amelyekről nehezen hihetjük, hogy a „véletlen” termékei. Ezek a tények a twistor-tér *komplex* szerkezetével kapcsolatosak és azzal a meglepő és sokféle szereppel, amelyet a twistorok holomorf (azaz komplex analitikus) függvényei játszanak. A twistor-elméletben a geometria és a komplex számok között fennálló jelentős kapcsolat teljes egészében azzal függ össze, hogy a twistorok fényszerű objektumot reprezentálnak. Ha az időszerű geodetikus vonalak terét használtuk volna, ettől meg lennének fosztva.

A twistortér szerkezetét meghatározó komplex számok mélyen és kibogozhatatlanul beleszövődnek a keletkező téridő geometriájába. Ugyanezek a komplex számok más alakban — mint kvantummechanikai valószínűségi amplitúdók — újra megjelennek. De már teljesen klasszikus relativisztikus téregyenletek megoldásában is meglepően gyakran szerepelnek holomorf függvények; és a függvény valós és képzetes része *egyaránt* jelentős (lásd az irodalmi hivatkozásokat [9—15]). A twistorelmélet valószínűleg erre a jelenségre is tud részleges magyarázatot adni. Az ilyen egységesítések és utalások azokra az egységesítésekre, amelyekre a twistor-közelítés ad lehetőséget, számomra meggyőzőbb indoklást nyújt, mint az elmélet bármelyik határozottabb eredménye.

A twistorelmélet eredményei jelen állapotának jellemzésére — hacsak egyik területen is — érdemes megemlítenünk, hogy a szórás-elméletben a twistorok szép módszert szolgáltatnak zérus nyugalmi tömegű részecskék esetében a hullámcsomagok kezelésére. A számolások végrehajtása véges mennyiségeknek zárt kontúrok mentén való integrálásával történik. Az ilyen integrálások eredményei mindig véges mennyiségek és — úgy látszik — az elmélet mentes azoktól a divergenciáktól, amelyek a hagyományos kvantum-térelméletben szoktak fellépni. Még annak lehetősége is fennáll, hogy bizonyos twistorintegrálok (amelyek *zárt* twistor-diagramoknak felelnek meg (lásd a 4. §-t)) esetleg kombinatorikai számolásra vezethetők vissza. És ha így van, akkor közelekvő az a gondolat, hogy a twistorelmélet és a spinhálózat-elmélet között igen szoros analógia áll fenn. Pillanatnyilag azonban még nem világos, hogy ezeket a véges integrálokat hogyan kell interpretálni vagy általában ezeket a twistor-integ-



rálókat tulajdonképpen hogyan kell felépíteni. Továbbá: noha a nyugalmi tömeg bizonyos eljárásokkal bevezethető az elméletbe, de ekkor valószínűleg nem zárt görbe mentén történő integrálokra juthatunk, és így az eredmények véges volta nem biztosított. Itt az történhet, hogy a nyugalmi tömeg bevezetésével egyidejűleg az általános relativitás-elméletet is be kell építeni, ha meg akarjuk tartani azt a lehetőséget, hogy véges elméletet kapjunk. Ez összhangban látszik lenni azzal az — a hagyományos elmélettel kapcsolatban gyakran említett — óhajjal, hogy a kvantált gravitációnak képesnek kellene lennie arra, hogy a — más úton előálló — összes divergens integrál természetes levágását megadja [16—18]. Jelenleg sajnos ennél sokkal többet nem remélhetünk.

## 2. A görbüetlen tér twistorai

A twistor-fogalom formális bevezetésére több út áll rendelkezésre. Ezek közül a zérus nyugalmi tömegű részecske impulzus — és impulzusmomentum — szerkezetét felhasználó módszer áll talán legközelebb a fizikához. Itt csak a sík (vagy konform módon sík) téridő twistoraival fogok foglalkozni. A görbült téridő twistorait az 5. §-ban fogom tárgyalni.

Vizsgáljunk meg egy, az  $M$  Minkowski-térben levő klasszikus rendszert, amelynek egy  $O$  origóra vonatkozó  $p^a$  teljes impulzus négyesvektora\* és  $M^{ab}(= -M^{ba})$  impulzusmomentum bivektora egyezik egy  $s$  helicitású és zérus nyugalmi tömegű részecske ugyanezen adataival. Ekkor

$$S_a = s p_a, \quad (2.1)$$

ahol az

$$S_a = \frac{1}{2} e_{abcd} p^b M^{cd} \quad (2.2)$$

vektor a Pauli—Lubanski-féle spin-vektort jelenti ( $e_{abcd} = e_{[abcd}$ ;  $e_{0123} = 1$ ). Mivel

\* A latin kisbetűket a négydimenziós téridő-indexek jelölésére használjuk; a latin nagy betűket a kétdimenziós komplex spinorindexeket jelöljük, s ha ezeket vesszővel látjuk el, akkor a konjugált komplex spin-teret jelenti. Az itt használt indexeket — (7) sz. irodalmi hivatkozásban leírt értelemben — „absztrakt”-oknak tekintjük, de sok helyen zavar nélkül értelmezhetők — a hagyományos módon — komponensek összességéeként. A számindexek közönséges Minkowski-féle jobbsodrású koordináta rendszerre vonatkoznak, amelyben a vonalelem négyzete:

$$(dx^0)^2 - (dx^1)^2 - (dx^2)^2 - (dx^3)^2,$$

valamint egy közönséges konstans spin-bázisra, amelyben a  $V^a$  vektort a

$$\begin{pmatrix} V^{00'} & V^{01'} \\ V^{10'} & V^{11'} \end{pmatrix} = 2^{-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} V^0 + V^1 & V^2 + iV^3 \\ V^2 - iV^3 & V^0 - V^1 \end{pmatrix}$$

mátrix állítja elő. A spinor-indexek lehetnek felső vagy alsó indexek, amelyek között a következő szabály áll fenn:

$$\alpha^A = \varepsilon^{AB} \alpha_B, \alpha_B = \alpha^A \varepsilon_{AB}, \beta^{A'} = \varepsilon^{A'B'} \beta_{B'}, \beta_{B'} = \beta^{A'} \varepsilon_{A'B'}$$

és így  $\alpha^0 = \alpha_1$ ,  $\alpha^1 = -\alpha_0$ , stb.

Ha az indexek kerek zárójelbe vannak téve, ez szimmetrizálást, ha szögletes zárójelbe, ez antiszimmetrizálást jelent.



$p^a$  fényszerű és jövőbe mutató ( $p_a p^a = 0, p^0 > 0$ ), ezért a  $p_a$ -hoz tartozó  $p_{AA'}$  kétindexes spinor-kifejezés a következő alakú:

$$p_{AA'} = \bar{\pi}_A \pi_{A'}. \quad (2.3)$$

Itt  $\pi_{A'}$  (duális, konjugált) spin-vektor. A (2.1) összefüggésből, valamint (2.2)-ből következik [19], hogy egy  $\omega^A$  spin-vektorral az impulzusmomentum

$$M^{AA'BB'} = i\omega^{(A} \bar{\pi}^{B)} \varepsilon^{A'B} - i\varepsilon^{AB} \bar{\omega}^{(A'} \pi^{B')} \quad (2.4)$$

alakban írható fel. Ha feltesszük, hogy  $\pi_{A'} \neq 0$ , akkor az  $(\omega^A, \pi_{A'})$  pár — (2.3) és (2.4) alapján — egyértelműen meghatároz egy  $p_a$  impulzust és egy  $M^{ab}$  impulzusmomentumot és kielégíti a tömeggel nem rendelkező részecskére vonatkozó fenti követelményeket. Megfordítva: ha  $p_a$  és  $M^{ab}$  a fenti módon adottak, akkor  $(\omega^A, \pi_{A'})$  megválasztásában éppen egy közös fázisforgatás szabadsági foka megengedett ( $\theta$  valós).

$$\omega^A \rightarrow e^{i\theta} \omega^A, \pi_{A'} \rightarrow e^{i\theta} \pi_{A'}$$

$\omega^A$ -t és  $\pi_{A'}$ -t nevezzük el a  $Z^\alpha$  twistor\* két spinor-része-nek és ezt így írjuk fel:

$$Z^\alpha \leftrightarrow (\omega^A, \pi_{A'}). \quad (2.5)$$

A  $Z^\alpha$  twistor konjugált komplexe a  $\bar{Z}_\alpha$  duális objektum, amit a

$$\bar{Z}_\alpha \leftrightarrow (\pi_A, \bar{\omega}^{A'}) \quad (2.6)$$

alakban írhatunk fel.  $Z^\alpha$  és  $\bar{Z}_\alpha$  skalárszorzata

$$Z^\alpha \bar{Z}_\alpha = \omega^A \bar{\pi}_A + \pi_{A'} \bar{\omega}^{A'}. \quad (2.7)$$

Ha (2.3)-at és (2.4)-et behelyettesítjük (2.2)-be és (2.1)-be, akkor (némi számolás után) azt kapjuk, hogy

$$Z^\alpha \bar{Z}_\alpha = 2s \quad (2.8)$$

és így a (2.7) twistor-„norma” a zérus nyugalmi tömegű részecske helicitását méri.

$$A \quad (Z^0, Z^1, Z^2, Z^3) = (\omega^0, \omega^1, \pi_0, \pi_1)$$

twistor-komponensek konjugált komplexeinek képzésére szolgáló szabály a következő alakú lesz

$$\bar{Z}^0 = \bar{Z}_2, \bar{Z}^1 = \bar{Z}_3, \bar{Z}^2 = \bar{Z}_0, \bar{Z}^3 = \bar{Z}_1 \quad (2.9)$$

egy szokványos bázisban, ahol  $\bar{Z}^0$  a  $Z^0$  stb. szám konjugált komplexét jelenti. A (2.8) hermitikus kifejezés a

$$Z^0 \bar{Z}^2 + Z^2 \bar{Z}^0 + Z^1 \bar{Z}^3 + Z^3 \bar{Z}^1 = 2s \quad (2.10)$$

alakban írható (+ + - -) előjelezéssel.

\* Az itt használt jelölések a [19] irodalom jelöléseit követik. Ezek bizonyos lényeges vonatkozásokban különböznek a [20] és [32]-ben használtaktól.

A twistor-komponensek, valamint az impulzus és impulzusmomentum között levő explicit kapcsolatot az alábbi képletek adják

$$\begin{aligned}
 p^0 &= 2^{-\frac{1}{2}}(Z^3\bar{Z}_1 + Z^2\bar{Z}_0), \quad p^1 = 2^{-\frac{1}{2}}(Z^3\bar{Z}_1 - Z^2\bar{Z}_0) \\
 p^2 &= 2^{-\frac{1}{2}}(-Z^2\bar{Z}_1 - Z^3\bar{Z}_0), \quad p^3 = i2^{-\frac{1}{2}}(Z^2\bar{Z}_1 - Z^3\bar{Z}_0) \\
 M^{01} &= -M^{10} = \frac{i}{2}(Z^0\bar{Z}_0 - Z^1\bar{Z}_1 - Z^2\bar{Z}_2 + Z^3\bar{Z}_3), \\
 M^{02} &= -M^{20} = \frac{i}{2}(Z^0\bar{Z}_1 + Z^1\bar{Z}_0 - Z^2\bar{Z}_3 - Z^3\bar{Z}_2), \\
 M^{03} &= -M^{30} = \frac{1}{2}(Z^0\bar{Z}_1 - Z^1\bar{Z}_0 - Z^2\bar{Z}_3 + Z^3\bar{Z}_2), \\
 M^{12} &= -M^{21} = \frac{i}{2}(Z^0\bar{Z}_1 - Z^1\bar{Z}_0 + Z^2\bar{Z}_3 - Z^3\bar{Z}_2), \\
 M^{32} &= -M^{23} = \frac{1}{2}(Z^0\bar{Z}_0 - Z^1\bar{Z}_1 + Z^2\bar{Z}_2 - Z^3\bar{Z}_3), \\
 M^{13} &= -M^{31} = \frac{1}{2}(Z^0\bar{Z}_1 + Z^1\bar{Z}_0 + Z^2\bar{Z}_3 + Z^3\bar{Z}_2), \\
 M^{00} &= M^{11} = M^{22} = M^{33} = 0.
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

Fentebb komponensek segítségével adtuk meg egy twistor reprezentációját adott  $O$  origóra vonatkozólag. Megvizsgáljuk, hogy a  $Z^\alpha$  twistor leírása az origó változtatásával hogyan változik. Az absztrakt twistort is fizikai vagy geometriai objektumnak kell tekinteni, amely az origó tetszőleges megválasztásától nem függ, de a komponensekkel való előállítása már igen.  $Z^\alpha$  (absztrakt) spinor-részei (bár az egyik csak triviális módon, de) szintén függenek az origó megválasztásától. Ha  $X \in M^4$ -ben tetszőleges „origó-pont”-ot jelöl, akkor  $\omega^A$  és  $\pi_{A'}$   $X$  függvényei lesznek.  $\omega^A$ -t és  $\pi_{A'}$ -t valóban igen speciális típusú spinor-tereknek tekinthetjük. A helytől való függésük megállapítása céljából emlékeztetünk arra transzformációs formulára, amelynek segítségével megkaphatjuk az impulzusmomentum változását, ha az origót változtatjuk.  $O$  legyen a rögzített origó és  $X$  egy változó pont, amelynek  $O$ -ra vonatkozó helyvektora  $x^a$ . Az  $O$ -ban definiált mennyiségek jele alá az „ $O$ ” szimbólumot írjuk. Az  $X$ -re vonatkozó  $p_a$  impulzusra és  $M^{ab}$  impulzusmomentumra azt kapjuk, hogy:

$$p_a = p_a, \quad M^{ab} = M^{ab} - 2x^{[a}p^{b]}.$$

A (2.3) és (2.4) kifejezések alapján és kikötve, hogy  $\pi_{A'}$  fázisa is konstans legyen (vagyis a  $\pi_{A'}$  zászló-síkjai párhuzamosak legyenek), azt kapjuk, hogy egy általános helyzetű  $X$  pontban  $Z^\alpha$  spinor-részei:

$$\omega^A = \omega^A - ix^{AA'}\pi_{A'}, \quad \pi_{A'} = \pi_{A'}. \tag{2.12}$$



Figyeljük meg, hogy az  $\omega^A$  spinortér a helynek lineáris függvénye. Kielégíti továbbá a

$$\nabla_{B'}^{(B} \omega^A) = 0 \quad (2.13)$$

„téregyenlet”-et, ahol  $\nabla_{AA'}$  a közönséges  $\partial/\partial x^{AA'}$  gradiens (vagy kovariáns derivált) operátort jelenti. A (2.13) egyenletet *twistoregyenlet*nek nevezzük. Könnyen megmutathatjuk, hogy megfordítva [19, 20]: (2.13) általános megoldása valójában megegyezik a (2.12)-ben található,  $\omega^A$ -ra vonatkozó kifejezéssel, amelyben  $\omega^A$  és  $\pi_{A'}$  tetszőleges (konstans) spinorok. Így a twistoregyenlet megoldásai egy másik lehetőséget adnak (az  $M^I$ -ben levő) twistorok definiálására. A  $\pi_{A'}$  (konstans) spinorteret a

$$\nabla_{AA'} \omega^B = -i \varepsilon_A^B \pi_{A'} \quad (2.14)$$

egyenlet alapján közvetlenül az  $\omega^A$  térből származtathatjuk. Az  $(\omega^A, \pi_{A'})$  *tér-pár* — amelyek között a (2.14) kapcsolat áll fenn — a  $Z^x$  twistor definíciójának is tekinthető. Mindez  $Z^x$ -val megadott klasszikus, tömegnélküli részecske impulzusát és az impulzusmomentumát a téridő egy pontja körül — (2.3) és (2.4) alapján — az  $\omega^A$  és a  $\pi_{A'}$  tér írja le.

Ha a twistor-fogalom definiálására a (2.31) twistoregyenletet használjuk, akkor a *konform invariancia* — és az eljárás egyik előnye — expliciten megnyilvánul. Tegyük fel, hogy  $g_{ab}$  metrikáját a

$$g_{ab} \rightarrow \hat{g}_{ab} = \Omega^2 g_{ab} \quad (2.15)$$

szerint átskáláztuk, ahol  $\Omega$  folytonos pozitív függvény  $M^I$ -en. A  $g_{ab}$  új metrika általában görbült lesz (de természetesen konform módon simának kell lennie). (2.15)-öt kiegészítjük az alábbiakkal:

$$\hat{\varepsilon}_{AB} = \Omega \varepsilon_{AB}, \hat{\varepsilon}_{A'B'} = \Omega \varepsilon_{A'B'}, \hat{\varepsilon}^{AB} = \Omega^{-1} \varepsilon^{AB}, \hat{\varepsilon}^{A'B'} = \Omega^{-1} \varepsilon^{A'B'} \quad (2.16)$$

(ez összhangban van a  $g_{ab} = \varepsilon_{AB} \varepsilon_{A'B'}$  „absztrakt indexű” egyenlettel.  $\hat{\varepsilon}_{AB}$  komponenseit — ha úgy tetszik — *vehetjük* 0,  $\Omega$ ;  $-\Omega$ , 0-nak, de a 0, 1;  $-1$ , 0 alkalmasabb, általánosan használt alak is használható, ha a bázis-spinorokat is megfelelően újra skáláztuk).  $\hat{g}_{ab}$  használata esetén  $\hat{\nabla}_a$  kovariáns derivált operátort az eredeti  $\nabla_a$ -ból a következőképpen kapjuk:

$$\begin{aligned} \hat{\nabla}_{AA'} \chi_{B...G'}^{K...Q'} &= \nabla_{AA'} \chi_{B...G'}^{K...Q'} - \gamma_{BA'} \chi_{A...G'}^{K...Q'} - \dots \gamma_{AG'} \chi_{B...A'}^{K...Q'} + \\ &+ \varepsilon_A^K \gamma_{YA'} \chi_{B...G'}^{Y...Q'} + \dots \varepsilon_{A'}^{Q'} \gamma_{AY'} \chi_{B...G'}^{K...Y'}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

ahol

$$\gamma_a = \Omega^{-1} \nabla_a \Omega = \nabla_a \log \Omega. \quad (2.18)$$

Ha (2.17)-et (2.13)-ra alkalmazzuk, azt kapjuk, hogy

$$\hat{\nabla}_{B'}^{(B} \omega^A) = 0$$

amiből látható, hogy a twistoregyenlet konform módon invariáns, és hogy egy twistor leírása az  $\omega$ -térral függetlenül a konform skálázástól. (2.17)-et (2.14)-re is alkalmazhatjuk és ebből levezethető az

$$\hat{\omega}^A = \omega^A, \hat{\pi}_{A'} = \pi_{A'} + i \gamma_{AA'} \omega^A \quad (2.19)$$



törvény, amelyről leolvashatjuk, hogy egy  $Z^\alpha$  twistor  $(\omega^A, \pi_{A'})$  leírása hogyan viselkedik konform újra-skálázás esetén. Megjegyzendő továbbá, hogy

$$\hat{\omega}^A \hat{\pi}_A + \hat{\pi}_{A'} \hat{\bar{\omega}}^{A'} = \omega^A \pi_A + \pi_{A'} \bar{\omega}^{A'}$$

amiből következik, hogy a  $2s = Z^\alpha \bar{Z}_\alpha$  mennyiség konform átskálázás esetén invariáns, s így a helicitás mértéke konformisan invariáns mennyiség. (A (2.12)-ből az is nyilvánvaló, hogy  $s$  nem függ az origó megválasztásától.

Ha  $\Omega$  az

$$\Omega = A \{(x^a - B^a)(x_a - B_a)\}^{-1} \quad (2.20)$$

speciális alakú, ahol  $A$  és  $B^a$  konstans, akkor  $g_{ab}$  ismét sima — de a  $B^a$  helyvektorú  $B$  pont fénykúpján nincs definiálva. Ha a (korlátozott) Poincaré-csoport hat ezekre az egymással konform kapcsolatban álló sima metrikákra, akkor olyan transzformáció-készletet kapunk, amely a 15 paraméteres  $C_+^\dagger(1,3)$  konform csoportot generálja. A twistoregyenlet nyilvánvalóan Poincaré-invariáns — és ez a fentebb említett sima metrikára igaz. Ebből következik, hogy ezen 15 paraméteres konform csoport hatására a twistor fogalma invariáns.

Van azonban még egy tulajdonság, amelyet számításba kell vennünk, ha twistorokat és konform csoportokat globálisan vizsgálunk. Már láttuk, hogy (2.20) egy bizonyos fénykúpon nincs definiálva. Ez a fénykúp az új sima tér „végtelen”-je lesz. Pontos kifejezéssel élve: a konform csoport valójában egyáltalán nem a Minkowski-térre, hanem az  $\mathbf{M}$  kompakttá tett Minkowski-térre hat. Utóbbit  $\mathbf{M}'$ -ből úgy kapjuk [20, 21, 4], ha ehhez a végtelenben egy  $\mathcal{I}$  (csatlakozó) fénykúpot illesztünk és identifikálunk a kúpon át\*. Az  $\mathcal{I}$  csúcspontja egy új pont,  $I$ , ami  $\mathbf{M}$  konform szerkezete szempontjából az  $\mathbf{M}$  összes többi pontjával egyenrangú. Ha egy másik sima metrikát választunk (mondjuk azt, amelyiket (2.16) adja, ugyanakkor  $\Omega$ -t pedig (2.20)), akkor egy másik pontot kapnánk (ebben az esetben  $B$ -t), amely a végtelenben átvénne  $I$ -nek, mint az új fénykúp csúcsának szerepét. A kompakt és konformisan homogén  $\mathbf{M}$ -tér topológiája  $S^3 \times S^1$ .

(2.13) konform invarianciája miatt  $\omega^A$  bármelyik megoldása kiterjeszthető lokálisan  $\mathcal{I}$ -n keresztül, ha egészen egyszerűen olyan metrikát válsztunk, ami ott véges. Ekkor az ember azt várná, hogy  $\omega^A$  globálisan definiált lesz az egész  $\mathbf{M}$ -ben. Kiderül azonban, hogy  $\omega^A$  — mikor  $\mathcal{I}$ -n átmegy — egy  $i$  faktoriall (illetve  $-i$ -vel, attól függően, hogy  $\mathbf{M}$ -nek milyen spin-szerkezetet választottunk) ugrik. Így  $\omega^A$ -t egy olyan spinortérnek tekinthetjük, amely  $\mathbf{M}$ -nek a négyszeres fedőterén [22] definiált, vagy — ami ezzel egyértelmű —  $\mathbf{M}$  egy „négyértékű” terének vehetjük, minden pontjában ezzel a négy értékkel:  $\omega^A, i\omega^A, -\omega^A, -i\omega^A$ . Ez a négyértelműség az (1.2) helyi izoformizmus „négy-az-egyhez” természetének tulajdonítható. A fenti tárgyalásból valóban következik, hogy az  $\mathbf{M}$ -en levő  $C_+^\dagger(1,3)$  hatására a twistorok az  $SU(2,2)$  csoportnak megfelelően transzformálódnak. A megfelelő invariáns hermitikus alak nem más, mint (2.10).

Most fordítsuk figyelmünket egy  $Z^\alpha$  twistor geometriai leírására. Két lényegében különböző esetet kell megvizsgálnunk, mégpedig egy *nulla* twistor ( $Z^\alpha \bar{Z}_\alpha = 0$ ) és egy *nem-nulla* twistor ( $Z^\alpha \bar{Z}_\alpha \neq 0$ ) esetét. Az első esetben (feltéve azt is, hogy  $Z^\alpha \neq 0$ ),

\* Semmiféle *fizikai* jelentést ne tulajdonítsunk annak a ténynek, hogy itt  $\mathcal{I}^+$  jövő fényyszerű végtelent és az  $\mathcal{I}^-$  múlt fényyszerű végtelent azonosítottuk. A (tömegnélküli) fizikai terek általában nem folytonosak  $\mathcal{I}$ -n, ha szórás lép fel.



**M**-ben van a pontoknak olyan összessége, amely mentén  $\omega^A$  eltűnik. Ez az összesség fényszerű egyenes vonal (vagy fényszerű geodetikus vonal, ha **M**-nek konformisan sima metrikát adunk), s egyszerűen  $Z$ -vel jelöljük. Fizikai szempontból  $Z$ -t a  $Z^\alpha$ -val leírt klasszikus, tömeg nélküli részecske világvonalának tekinthetjük;  $Z$  az a hely, amely mentén  $M^{ab}$  eltűnik.  $Z$  egyenletét könnyen megkapjuk, ha (2.12)-ben  $\omega^A=0$ -t helyettesítünk, vagyis

$$\omega^A = ix^{AA'} \pi_{A'} \quad (2.21)$$

ahol  $x^a$  egy, a  $Z$ -n levő pontnak az  $O$  origóra vonatkozó helyvektora (lásd a 3. ábrát). Ha van ilyen  $x^a$ , akkor ebből a többit úgy kapjuk meg, hogy  $x^{AA'}$ -t  $X^{AA'} + k\pi^{-A}\pi_{A'}$ -vel helyettesítjük és a  $k$  valós számot változtatjuk. Ebből látható, hogy  $Z$  valóban fényszerű egyenes vonal, s iránya megegyezik a  $p^a$  impulzus irányával. A  $Z$  vonal — komplex arányossági tényezőtől eltekintve — teljesen meghatározza a  $Z^\alpha$  twistort. Ennek az arányossági tényezőnek az abszolút értékét a tömeg nélküli részecske impulzus-skálázása (vagyis „energia”-ja) határozza meg, argumentumát pedig a  $\pi_{A'}$  fáziisa, amit geometriailag úgy képzelhetünk el, mint egy „zászló-sík”-ot, azaz olyan 2-sík-elemet, amely fényszerű és  $Z$ -re ortogonális.

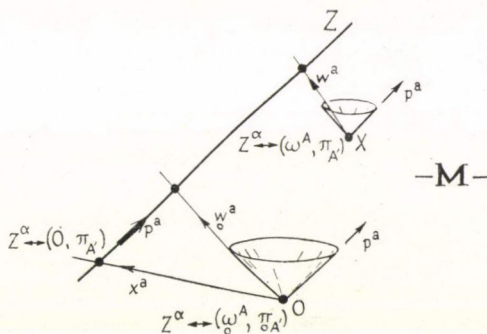
$Z$  minden egyes  $X$  pontjához tartozik egy zérustól különböző  $\omega^A$  spinvektor. Ez meghatároz egy  $w^a$  fényszerű vektort a következőképpen:

$$w^{AA'} = \omega^A \omega^{-A'} \quad (2.22)$$

Most az  $X$  ponton átmenő,  $w^a$ -val egyező irányú fényszerű egyenes vonal (esetleg  $\mathcal{J}$ -n) metszi  $Z$ -t. Hogy ez valóban így van, könnyen belátható az  $O$  pontban, mivel egy a (2.21)-et kielégítő fényszerű  $x^a$ -nak arányosnak kell lennie  $w^a$ -val, az általános eset pedig úgy kapjuk, hogy az origót eltoljuk. Így a  $w$ -tér az **M**-ben levő fényszerű egyenes vonalak kongruenciájához húzott azon érintők halmazát definiálja, amelyek metszik  $Z$ -t. Megjegyezzük, hogy ez a  $\pi_{A'}=0$  esetén is igaz, még ha itt a twistor-leírás, mint a tömeg nélküli részecske impulzusának és impulzusmomentumának definíciója csődöt is mond. Ebben az esetben az  $\omega^A$  tér konstans (lásd (2.12)-t), így a  $w^a$ -k mind párhuzamosak. A  $Z$  vonal az  $\mathcal{J}$  egyik alkotója lesz, a tömeg nélküli részecske most a végtelenben van — és az energiája zérus! A geometriának még ekkor is van értelme, ha nem az eredeti **M**<sup>I</sup>-t, hanem a kompakttá tett **M**-et használjuk.

$Z^\alpha \bar{Z}_\alpha \neq 0$  esetén is használhatjuk a  $w^a$  irányokat a  $Z^\alpha$  twistor geometriai előállítására (egy arányossági tényezőtől eltekintve), annak ellenére, hogy **M**-nek most nincsenek olyan (valós) pontjai, amelyekben  $\omega^A$  eltűnik és így (valós)  $Z$  fényszerű vonal nincs. A  $w$  vektorok továbbra is érintői **M**-ben a fényszerű vonalak egy kongruenciájának (nyalábjának), de itt egymás körül csavarodnak\* és sohasem metszik egy-

\* Innen ered a „twistor” elnevezés.



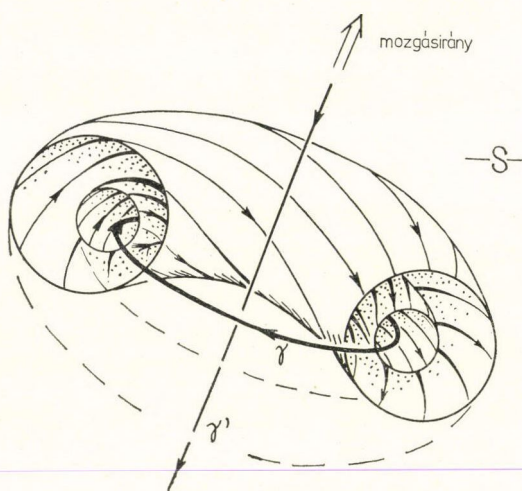
3. ábra



mást. Ha  $Z^a \bar{Z}_a > 0$ , akkor a csavarodás jobb sodrású, ha  $Z^a \bar{Z}_a < 0$ , akkor bal sodrású. Az ilyen kongruenciát *Robinson-kongruenciának* nevezzük, melynek részletes geometriai leírása [20] a következő. Vizsgáljuk meg az  $M^1$ -nek egy  $\mathcal{S}$  térszerű hipersík-metszetét, amelyet tegyük fel,  $x^0 = \text{konstans}$  definiál. A kongruencia vonalának iránya az  $\mathcal{S}$  euklideszi hármastér minden pontjában  $w^a$  irányával fog megegyezni, amelyet úgy lehet elképzelni, hogy ortogonálisan  $\mathcal{S}$ -be vetítjük. Ez  $\mathcal{S}$ -ben egy  $v^a$  egységvektorteret definiál, ami a

$$(v^0, v^1, v^2, v^3) = (w^0)^{-1}(0, w^1, w^2, w^3) \quad (2.23)$$

összefüggéssel adható meg. A  $v^a$  geometriája teljesen meghatározott, ha ismerjük egy bizonyos (irányított)  $\gamma$  kör helyét  $\mathcal{S}$ -ben (és azt, hogy a kongruencia jobb vagy bal sodrású-e). Közös tengellyel bíró, kör keresztmetszetű tóruszok egy-



4. ábra

másba skatulyázott rendszerét kapjuk, amelyek  $\gamma$ -hoz tartanak (4. ábra). A  $v^a$  vektortér érinti a tóruszon levő körök rendszerét, amelyek a tórusz mindkét sugara mentén egyszer körülfordulva helyezkednek el. Így  $\mathcal{S}$ -et egy (irányított,  $\gamma$ -t is magában foglaló) körrendszer burkolja, amelyek közül kettőt-kettőt összekapcsol egy, a  $\gamma$  középpontján átmenő és annak síkjára merőleges  $\gamma'$  egyenes.  $\mathcal{S}$  minden pontjához egy és csak egy érintőirány — és így egy és csak egy  $v^a$  — tartozik. Ezért a Robinson-kongruencia vonalait utóbbiak  $\mathcal{S}$ -sel való metszetei definiálják, irányukat pedig (2.23) határozza meg.

Ha most megengedjük, hogy az  $x^0$  idő haladjon, akkor mindegyik vonalat egy olyan pont írja le, amely egyenes vonalon fénysebességgel mozog  $v^a$  irányában. Azt vesszük észre (ami eléggé meglepő), hogy a  $\gamma$  kör  $\gamma'$  mentén fénysebességgel halad.  $\gamma$ -t a  $Z^a$ -val leírt tömegnélküli részecske (relativisztikusan nem invariáns) hely- és spin-jellemzésének tekintethetjük,  $\gamma$  sugara pedig a spin-energia viszony mértéke. A  $Z^a \bar{Z}_a = 0$  határesetben  $\gamma$  egy ponttá zsugorodik, téridő-helye ekkor egyszerűen  $Z$ .

Itt érdemes megjegyezni, hogy a  $w^a$  vektortérnek egy további geometriai jelentése van. (2.13) és (2.14)-ből következik, hogy  $w^a$  kielégíti a

$$\nabla_w^{(ab)} = \frac{1}{4} g^{ab} \nabla_c w^c \quad (2.24)$$

konform Killing-egyenletet. Valóban kimutatható, hogy (2.24) mindegyik fényyszerű megoldása (2.22) alakú (vagy ugyanez a kifejezés negatív előjellel), ha  $\omega^A$  kielégíti



(2.13)-t. Az impulzusmomentum — (2.14) alapján —

$$M^{ab} = \nabla^a w^b \quad (2.25)$$

segítségével közvetlenül\* megkapható.

Arra is rámutathatunk, hogy az  $\omega^A$  spinortérre vonatkozó (2.13) twistoregyenlet — a 4-spinoros jelölést alkalmazva —

$$(\gamma_a \nabla_b + \gamma_b \nabla_a - \frac{1}{2} g_{ab} \gamma^c \nabla_c) \alpha = 0 \quad (2.26)$$

alakú, ahol  $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  az ismert Dirac-mátrixok,  $\alpha$  pedig Dirac-spinor, amely úgy van definiálva, hogy egy alkalmasan választott koordinátarendszerben  $(1+i\gamma_5)\alpha$  komponensei megegyeznek  $\omega^A$  komponenseivel,  $(1-i\gamma_5)\alpha$  komponensei pedig egy másik, (2.13) konjugáltjának megfelelő  $\tilde{\omega}^{A'}$  spinor komponenseivel. Ha ezen kívül  $(1-i\gamma_5)\alpha$ -t nullának vesszük és így  $\tilde{\omega}^{A'}$  is nulla vagy ha  $\alpha$  Majorana-spinor és így  $\tilde{\omega}^{A'} = \bar{\omega}^{A'}$ , akkor (2.26) egyenértékű (2.13)-val. Wess és Zumino [23] eredeti *szuperszimmetria-generátorai* ilyen objektumok, ezért lényegüket tekintve twistorok. (Wess és Zumino azonban kikötötték, hogy (2.26) megoldásai olyan operátorok legyenek, amelyek az antikommunációs relációkat kielégítik.) (2.26) megoldásai és a kompakt Killing-vektorok közötti kapcsolatra Wess és Zumino is felhívta a figyelmet.

Mostanáig leírásaink csak a valós Minkowski-térre vonatkoztak. Ha azonban megengedjük magunknak azt a luxust, hogy vizsgálatainkat kiterjesztjük a komplexszé tett téridőre, akkor a twistorelmélet nagy része igen egyszerűvé válik. A  $\mathbb{C}$  szimbólumot használom egy tér komplex változatának jelölésére. Így a  $\mathbb{CM}^I$  pontjait — a (valós)  $O$  origóra vonatkozólag — a

$$z^a = x^a + iy^a \quad (2.27)$$

helyvektorral jelölhetjük, ahol  $x^a$  és  $y^a$  valós világvektorok. Itt világossá válik, hogy  $\mathbb{CM}^I$ -ben van a pontoknak olyan helye — *tetszőleges*  $Z^a$  twistorra vonatkozólag —, ahol  $\omega^A$  eltűnik, kivéve azt a twistort, amelyre  $\pi_{A'} = 0$  (és  $\omega^A \neq 0$ ), amikor is a hely teljes egészében  $\mathbb{C}_\infty$ -n van. Ezt a helyet úgy kapjuk meg, ha (2.21)-ben  $x^{AA'}$ -t  $z^{AA'}$ -vel helyettesítjük. Mostantól kezdve (egészen az 5. §-ig) csak olyan leírásokkal foglalkozom, amelyek *rögzített*  $O$  origóra vonatkoznak és ezután *elhagyom* a szimbólumok alá írt „ $O$ ”-t és minden fontos mennyiségről felteszem, hogy  $O$ -ban definiálva van. A (2.21) egyenlet komplex pontok esetén

$$\omega^A = iz^{AA'} \pi_{A'} \quad (2.28)$$

alakú lesz. Ha feltesszük, hogy  $\pi_{A'} \neq 0$ , akkor a megoldások 2 komplex dimenziós (vagyis 4 valós dimenziós) helyet alkotnak, amely teljesen fényszerű sík. Mert ha  $z^a$  kielégíti (2.28)-at, akkor kielégíti

$$z^{AA'} + \lambda^A \pi^{A'} \quad (2.29)$$

is, ahol  $\lambda^A$  tetszőleges és mindegyik  $\lambda^A \pi^{A'}$  komplex világvektor fényszerű és egymásra ortogonális. Ezt a helyet ( $Z^a \leftrightarrow (\omega^A, \pi_{A'})$  esetén)  $CZ$ -vel jelölöm, bár valójában nem

\* Ebből következik, hogy ha lineárkombinációkat veszünk (lásd a 3. §-t), akkor feltesszük, hogy a speciális relativitáselméletben bármely rendszer impulzusmomentum-szerkezetének alakja megegyezik egy konform Killing-vektor rotációjával.

$Z$  komplexszé tételét jelenti —  $Z^\alpha \bar{Z}_\alpha$  akár egyenlő nullával, akár nem\*. Ha  $\pi_{A'} = 0$  (de  $\omega^A \neq 0$ ), szintén teljesen fényszerű komplex síkot kapunk, de ekkor ez teljes egészében  $C\mathcal{I}$ -en van. Ha  $CM$  egy  $R$  pontja  $CZ$ -en fekszik, akkor néha azt a kifejezést fogjuk használni, hogy  $R$  rajta fekszik a  $Z^\alpha$  twistoron, vagy azt mondjuk, hogy  $Z^\alpha$  átmegy  $R$ -en. Jegyezzük meg, hogy  $CZ$  pontjainak halmaza — egy arányossági tényezőtől eltekintve — egyértelműen meghatározza  $Z^\alpha$ -t. ( $Z^\alpha \neq 0$ ). Megjegyezendő továbbá, hogy  $CZ$ -ben csak akkor van valós pont, ha  $Z^\alpha \bar{Z}_\alpha = 0$ .

Ha  $Z^\alpha$  és  $Y^\alpha$  nem egyenlők zérussal és nem arányosak egymással, akkor  $CZ$ -nek és  $CY$ -nak csak egy közös pontja van. Ugyanis, ha  $Y^\alpha \leftrightarrow (\lambda^A, \mu_{A'})$  és ugyanakkor  $\mu_{A'} \pi^{A'} \neq 0$ , akkor ezt a metszéspontot úgy kapjuk meg, ha szimuláltan megoldjuk a  $\lambda^A = iz^{AA'} \mu_{A'}$  és a (2.28) egyenleteket; ekkor

$$z^{AA'} = i(\mu_B, \pi^{B'})^{-1} \{ \omega^A \mu^{A'} - \lambda^A \pi^{A'} \}. \quad (2.30)$$

De ha  $\mu_{A'} \pi^{A'} = 0$ , akkor — vagy  $CZ$  van  $C\mathcal{I}$ -en ( $\mu_{A'} = 0$ ), — vagy  $CY$  van  $C\mathcal{I}$ -en ( $\mu_{A'} = 0$ ) — vagy  $CZ$  és  $CY$  párhuzamosak ( $\pi_{A'}, \mu_{A'}$  arányosak); a metszéspont pedig mindegyik esetben a végtelenben van.  $CZ$  és  $CY$  metszéspontja akkor és csak akkor valós, ha

$$Z^\alpha \bar{Y}_\alpha = 0 \quad (2.31)$$

és ugyanakkor  $Z^\alpha \bar{Z}_\alpha = 0 = Y^\alpha \bar{Y}_\alpha$ .

Azon zérustól különböző  $X^\alpha$  twistorokra, amelyekhez tartozó  $CX$  átmegy  $CZ$  és  $CY$   $R$  metszéspontján, fennáll az

$$X^\alpha = \varrho Z^\alpha + \sigma Y^\alpha \quad (2.32)$$

összefüggés olyan tetszőleges  $\varrho$  és  $\delta$ -ra, amelyek közül az egyik zérustól különbözik. Így  $R$ -et magát is a (2.32) lineáris egyenletrendszer állítja elő. Az  $R$  pont előállítására felhasználhatjuk ezt a  $\begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}$  twistort:\*

$$R^{\alpha\beta} = Z^\alpha Y^\beta - Y^\alpha Z^\beta \quad (2.33)$$

$R^{\alpha\beta}$  felírható a (2.33) alakban, ha az alábbi két feltétel teljesül:

$$R^{(\alpha\beta)} = 0, \quad R^{[\alpha\beta} R^{\gamma]\delta} = 0. \quad (2.34)$$

A (2.34)-ben szereplő második feltétel ( $R^{\alpha\beta}$  „egyszerű” legyen) több más, előbbivel azonos értelmű alakban is felírható, mint például

$$R^{01} R^{23} + R^{02} R^{31} + R^{03} R^{12} = 0 \quad (2.35)$$

\* Ennek az a logikai alapja, hogy a  $CZ$  komplex hely a  $Z$  twistorra vonatkozólag sokkal jelentősebb, mint a sokkal „kisebb”  $Z$  valós hely. Tehát jobb, ha  $Z$ -t tekintjük a  $CZ$  valós ponthalmazának, mint  $CZ$ -t a komplexszé tett  $Z$ -nek.

\* A  $\begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix}$  értékű, vagy röviden  $\begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix}$ -twistor szimbólumának  $p$  darab felső és  $q$  darab alsó görög indexe van. Magasabb értékű twistorok felépítése az eredeti twistortér  $\left(\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}\right)$  értékű elemeiből — amilyen például  $Z^\alpha$  és ennek  $\left(\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}\right)$  értékű duálisa,  $\bar{Z}_\alpha$  — a tenzorokra vonatkozó algebrai szabályok szerint történik.



vagy

$$R^{\alpha\beta} R_{\alpha\beta} = 0, \quad (2.36)$$

vagy

$$R^{\alpha\beta} R_{\alpha\gamma} = 0, \quad (2.37)$$

ahol  $R^{\alpha\beta}$  duálisa,  $R_{\alpha\beta}$  a következő:

$$R_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \varepsilon_{\alpha\beta\varrho\sigma} R^{\varrho\sigma} \quad (2.38)$$

és innen

$$R^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \varepsilon^{\alpha\beta\varrho\sigma} R_{\varrho\sigma}, \quad (2.39)$$

amelyben az  $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}$  és  $\varepsilon^{\alpha\beta\gamma\delta}$  alternáló twistorok a következőképpen vannak definiálva:

$$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta} = \varepsilon_{[\alpha\beta\gamma\delta]}, \quad \varepsilon^{\alpha\beta\gamma\delta} = \varepsilon^{[\alpha\beta\gamma\delta]}, \quad \varepsilon_{0123} = \varepsilon^{0123} = 1, \quad (2.40)$$

(a komponenseket a szokásos koordináta-rendszerben véve föl). Az  $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}$  és  $\varepsilon^{\alpha\beta\gamma\delta}$  twistorok az (aktív)  $SU(2,2)$  transzformációinak hatására invariánsak ( $SU(2,2)$  „S” részének ez a lényege); így például (2.12) és (2.19) megőrzik az alakjukat.

Ha egy  $T_{\alpha\beta\gamma\dots\eta}^{\varrho\sigma\dots\kappa}$  twistor  $\bar{T}^{\alpha\beta\gamma\dots\eta}_{\varrho\sigma\dots\kappa}$  konjugált komplexét (2.5), (2.6) és (2.9) egyszerű kiterjesztésével definiáljuk, akkor a szokásos komponensek között az alábbi kapcsolat áll fenn:

$$\overline{T_{320\dots1}^{21\dots0}} = \bar{T}^{102\dots3}_{03\dots2} \quad (2.41)$$

és így

$$\bar{\varepsilon}_{\alpha\beta\gamma\delta} = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}, \quad \bar{\varepsilon}^{\alpha\beta\gamma\delta} = \varepsilon^{\alpha\beta\gamma\delta}. \quad (2.42)$$

Kiderül ezután, hogy  $R^{\alpha\beta}$  komplex konjugáltja,  $\bar{R}_{\alpha\beta}$ , duális leírását adja **CM** azon  $\bar{R}$  pontjának, amely  $R$  konjugált komplexe (ahol  $\bar{R}$  helyvektora  $z^a = x^a - iy^a$ , ha  $R$  helyvektora — mint (2.27)-ben —  $z^a$ ). Továbbá,  $\bar{R}_{\alpha\beta}$  duálisa szintén  $R_{\alpha\beta}$  konjugált komplexe (lásd (2.42)-t). Ez azt jelenti, hogy az  $\bar{R}^{\alpha\beta}$  jelölés egyértelmű és — (2.33)-mal összhangban — egy az  $\bar{R}$ -et reprezentáló twistort jelöl.

Ha  $R$  valós pont,  $\bar{R}^{\alpha\beta}$  és  $R^{\alpha\beta}$  arányosak egymással.  $R^{\alpha\beta}$  fázisát úgy választhatjuk meg, hogy az arányossági tényező az egység legyen. Ekkor — (2.40) és (2.41) alapján — megkapjuk azokat a kikötéseket, amelyek biztosítják, hogy a komponensek valóságosak legyenek:

$$\overline{R^{01}} = R^{01}, \quad \overline{R^{23}} = R^{23}, \quad \overline{R^{02}} = -R^{31}, \quad \overline{R^{03}} = -R^{03}, \quad \overline{R^{12}} = -R^{12}. \quad (2.43)$$

Ezekből pedig következik, hogy (2.35) előjelezése  $(+ - - - +)$ . A (2.35) kikötésnek eleget tevő komponensek egy valós 6-dimenziós teret írnak le, amelynek az origóján áthaladó sugarak a kompakttá tett **M** Minkowski-tér egy modelljét [21], [4] alkotják. Az  $SU(2,2)$  twistor-transzformációk ebben a 6-dimenziós térben „forgásokat” indukálnak, megtartják a (2.35) másodfokú kifejezést és előállítják az

$$SU(2,2) \rightarrow O(2,4)$$

lokális izoformizmust [3], [4] (ez egy  $(2-1)$  leképezés az  $O(2,4)$  folytonos komponensére) és ez mintegy félúton van  $(1,2)$  felé.

$R$ -nek nem kell végesben (vagyis  $M^I$ -ben) fekvő pontnak lennie; tulajdonképpen  $R$ -et még az  $\mathcal{I}$  csúcspontjának,  $I$ -nek is vehetjük. Ebből megkapjuk a duális kapcsolatban álló  $I^{\alpha\beta}$  és  $I_{\alpha\beta}$  twistorokat, amelyeket expliciten a következő alakban vehetünk fel:

$$I^{\alpha\beta} \leftrightarrow \begin{bmatrix} \varepsilon^{AB} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, I_{\alpha\beta} \leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{A'B'} \end{bmatrix} \quad (2.44)$$

és ezeket *végtelen-twistoroknak* nevezzük. Az  $SU(2,2)$  transzformációk, amelyekre az  $I$  pont (vagyis — egy arányossági tényezőtől eltekintve —  $I^{\alpha\beta}$  és  $I_{\alpha\beta}$ ) invariáns, megadják a (korlátozott) Poincaré-csoportot az  $M^I$ -n levő dilatációkkal együtt. A dilatációkat azzal a körülménnyel küszöböljük ki, hogy  $I^{\alpha\beta}$  és  $I_{\alpha\beta}$  külön-külön invariáns legyen. Így a *konform invariancia megszűnését* úgy juttathatjuk kifejezésre a twistor-elméletben, (a Poincaré-invariancia megtartása mellett), hogy az  $I^{\alpha\beta}$  és  $I_{\alpha\beta}$  mennyiségeket expliciten beépítjük az algebrába. (2.37), (2.38) és (2.39) alapján

$$\begin{aligned} I_{\alpha\beta} &= -I_{\beta\alpha} = \bar{I}_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \varepsilon_{\alpha\beta\varrho\sigma} I^{\varrho\sigma}, \\ I^{\alpha\beta} &= -I^{\beta\alpha} = \bar{I}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \varepsilon^{\alpha\beta\varrho\sigma} I_{\varrho\sigma}, \\ I^{\alpha\beta} I_{\alpha\gamma} &= 0. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Ha  $R$  (valós vagy komplex) *véges* pont,  $I^{\alpha\beta}$ -t és  $I_{\alpha\beta}$ -t felhasználhatjuk  $R^{\alpha\beta}$ ,  $R_{\alpha\beta}$  normálására, midőn

$$R^{\alpha\beta} I_{\alpha\beta} = 2; \quad \text{és ugyanígy} \quad R_{\alpha\beta} I^{\alpha\beta} = 2. \quad (2.46)$$

Ha most  $r^a$  az  $R$ -nek 0-ra vonatkozó helyvektora, akkor (2.30) és (2.33) alapján

$$R^{\alpha\beta} \leftrightarrow \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} r_c r^c \varepsilon^{AB} & i r^A{}_{B'} \\ -i r_{A'}{}^B & \varepsilon_{A'B'} \end{bmatrix}, R_{\alpha\beta} \leftrightarrow \begin{bmatrix} \varepsilon_{AB} & i r_A{}^{B'} \\ -i r^{A'}{}_B & -\frac{1}{2} r_c r^c \varepsilon^{A'B'} \end{bmatrix}. \quad (2.47)$$

Ha  $R^{\alpha\beta}$  és  $R_{\alpha\beta}$  így vannak normálva, és ha a  $q^a$  és  $Q^{\alpha\beta}$  között ugyanolyan kapcsolat áll fenn, mint  $r^a$  és  $R^{\alpha\beta}$  között, akkor

$$Q^{\alpha\beta} R_{\alpha\beta} = -(q^a - r^a)(q_a - r_a). \quad (2.48)$$

Ebből kiolvasható, hogy  $Q^{\alpha\beta} R_{\alpha\beta}$  akkor és csak akkor nulla, ha a  $Q$  és  $R$  pontok közötti vektor fényszerű. Az utóbbi tény kimondásánál a (2.46) normálásra nincs szükség.  $\mathcal{CS}$  egy  $R$  pontját valóban az  $I^{\alpha\beta} R_{\alpha\beta} = 0$ -val jellemezhetjük, mivel ekkor  $R$  és  $I$  fényszerűen elválasztottak.

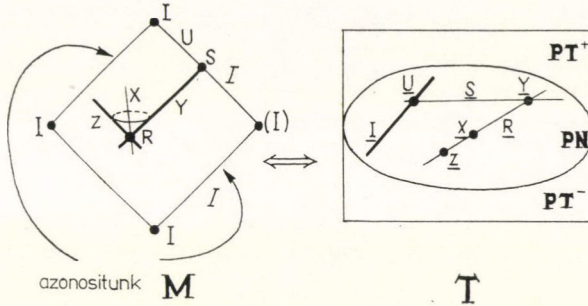
A geometriai elképzelés szempontjából sokszor alkalmasabb a három komplex dimenziós **PT** projektív twistorral dolgozik, mint a 4 komplex dimenziós **T** twistorral. Minden egyes  $Z \in \mathbf{PT}$  pont\* azon twistorok ekvivalencia-osztálya, amelyet úgy kapunk, hogy egy adott, nullától különböző  $Z^\alpha$  twistort megszorozunk az összes zérustól különböző komplex számmal (tehát  $Z^\alpha$  és  $\lambda Z^\alpha$  **PT**-nek ugyanazt a  $Z$  pontját állítja elő, ha  $\lambda \neq 0$ ). A fenti tárgyalásból látható, hogy egy 1—1 értelmű geometriai

\* Az 5. ábrán hullámosan aláhúzott  $Z$ ,  $R$ ,  $X$ ,  $Y$ ,  $S$ ,  $I$  betűk a szövegben félkövéren szedettek. Fordító megjegyzése.



megfelelkezés\* áll fenn **CM** pontjai és a **PT**-ben levő egyenes vonalak (komplex projektív vonalak) között. **CZ** és **CY** egyetlen **R** metszéspontját **PT**-ben a **Z** és **Y** pontokat összekötő egyetlen **R** vonal ábrázolja (lásd a 5. ábrát). **PT**-ben van egy speciális **I** vonal is, ami **CM** **I** pontját ábrázolja. A **CM**-ben levő **C $\mathcal{I}$**  pontjait **PT**-ben az **I** vonalat metsző vonalak reprezentálják.

Az **M** valós struktúra leírására segítségül kell hívnunk a  $Z^\alpha \rightarrow \bar{Z}_\alpha$  (pszeudo-) hermitikus megfelelkézt. Ez **PT**-n egy (pszeudo-) hermitikus korrelációt hoz létre,



5. ábra

aminek hatására (a  $Z^\alpha$  twistorral leírt) pontok és (a  $W_\alpha$  twistorral leírt) síkok felcserélődnek. A **Z** pont képe a  $\bar{Z}$  sík, a **W** sík képe a  $\bar{W}$  pont. (A  $W \subset PT$  sík azon **X** pontok összessége, amelyekre  $W_\alpha X^\alpha = 0$  stb.) A **Z** pont akkor és csak akkor fekszik **W**-n, ha **W** a  $\bar{Z}$ -n fekszik. Ha **R** az **Y** és **Z** pontokat összekötő egyenes, akkor  $\bar{R}$  az  $\bar{Y}$  és  $\bar{Z}$  síkok metszéspontja. Az  $\bar{R}$ -nek **CM**-ben megfelelő pont azonos az **R**-nek **CM**-ben megfelelő pont komplex konjugáltjával.

Egy zérustól különböző  $Z^\alpha$  twistor akkor és csak akkor nulla ( $Z^\alpha \bar{Z}_\alpha = 0$ ), ha a  $Z \in PT$ -n fekszik. Az ilyen pontok összességét **PN**-nel jelöljük, ahol **N** jelenti a **T**-ben levő nullatwistorok halmazát. **PT** azon **Z** pontjainak halmazát, amelyekre  $Z^\alpha \bar{Z}_\alpha > 0$  **PT**<sup>+</sup>-szal jelöljük; azt a halmazt, amelyre  $Z^\alpha \bar{Z}_\alpha < 0$  **PT**<sup>-</sup>-szal jelöljük. Így az ( $S^3 \times S^2$  topológiájú) **PN** tartomány a ( $CP^3$  topológiájú) **T**-t a **PT**<sup>+</sup> és **PT**<sup>-</sup> tartományokra osztja fel (mindkettő topológiája  $S^2 \times E^3$ ). **PN** pontjainak **M** fényyszerű vonalai felelnek meg.

A ( $W_\alpha$ -val leírt) **W** sík akkor és csak akkor érinti **PN**-et, ha  $W_\alpha \bar{W}^\alpha = 0$ , és ekkor az érintési pont  $\bar{W}$ . **W**-nek **PN**-nel való metszése minden esetben az **X** pontok egy rendszerét állítja elő (amit  $W_\alpha X^\alpha = 0 = \bar{X}_\alpha X^\alpha = 0$  ír le) és **M**-ben egy **X** fényvonalnyalábot definiál. Ez az a Robinson-nyaláb, amit a  $Z^\alpha = \bar{W}^\alpha \omega^A$  tere definiál, és ami a  $\bar{W}^\alpha W_\alpha = 0$  speciális esetben olyan fényyszerű vonalak rendszerére degenerálódik **M**-ben, amelyek mindegyike metszi a  $\bar{W}$  fényyszerű vonalat. Ha **R** teljes egészében **PN**-ben van, akkor a **PT**-ben fekvő **R** vonal **CM**-nek egy valós pontját (vagyis **M**-nek egy pontját reprezentálja. Ez az az eset, amikor a pont helyvektorának  $y^a$  képzetes része eltűnik. Másrészt azonban  $y^a$  ( $\neq 0$ ) tér-, fény-, vagy időszerű, aszerint, hogy **R** átmetszi **PN**-et, érinti **PN**-et vagy nem metszi **PN**-et. Utóbbi két esetben  $y^a$  jövőbe vagy múltba mutató aszerint, hogy  $R \subset PN \cup PT^-$  vagy  $R \subset PN \cup PT^+$ .

\* A geometriával foglalkozók számára ismerős ez a megfelelkézt: a **CM** teret a **PT**-ben lévő vonalak Klein-féle reprezentációjának (24) szokták nevezni.



A  $Z\epsilon PT$  ponthoz tartozó,  $CM$ -ben levő  $CZ$  pontok halmazának  $PT$ -ben egy  $Z$  átmenő vonalak csillagszerű alakzata felel meg.  $CZ$  komplex konjugáltjának,  $CZ$ -nek azonban  $PT$ -ben egészen másfajta — egy  $\bar{Z}$  síkon fekvő — vonalrendszer felel meg.

$CM$ -ben tehát kétféle teljesen fényyszerű síkunk van: az  $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$  twistorokból származó,  $CZ$ -hez hasonló síkok és a  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$  twistorokból származó,  $C\bar{Z}$ -hoz hasonló síkok. Az első esetet úgy írjuk le, mint (2.29)-ben tettük, ahol  $\pi^{A'}$ -t rögzítettük és  $\lambda^A$ -t változtattuk. A második esetben  $\lambda^A$ -t rögzítettük és  $\pi^{A'}$ -t változtattuk. Az egyes azonos típusú, teljesen fényyszerű síkoknak mindig van egyetlen közös pontja  $CM$ -ben. (Két pontot  $PT$ -ben egyetlen vonal köt össze; két sík metszése  $PT$ -ben egyetlen vonal.) Két különböző típusú, teljesen fényyszerű sík rendszerint egyáltalán nem metszi egymást; de ha mégis, akkor van egy teljes egészében közös komplex fényyszerű vonaluk. ( $PT$  egy általános síkjában egy olyan vonal sincs, amely átmenne a  $PT$  egy általános pontján; de ha a pont a síkon fekszik, akkor egy ilyen egy-komplexparaméteres vonalakból álló család megy át rajta.) Kimondhatjuk tehát, hogy a  $Z^a$  és  $X^a$  twistorok mindig metszik egymást. Ugyanez mondható a  $W_a$  és a  $U_a$  twistorokról is. De  $Z^a$  és  $W_a$  csak akkor metszik egymást, ha  $Z^a W_a = 0$ , és akkor van egy teljes, közös komplex fényyszerű vonaluk, ami  $CM$  pontjaiból áll.

### 3. Terek leírása twistorokkal

A 2. §-ban láttuk, hogy a Minkowski-tér geometriáját hogyan lehet új alakba önteni a twistortér-geometria segítségével. Bár ugyanaz az objektum — mondjuk egy téridő pont vagy egy fényyszerű vonal — igen különbözőnek mutatkozhat a két geometriában, a szabatos átírási eljárás létezése mégis azt mutatja, hogy ez a két kép — igen jól definiált értelemben — ekvivalens. Ez azonban egyáltalában nem azt jelenti, hogy az átírás az egyik formalizmusból a másikba nagyon könnyű. Az a tény, hogy két formalizmus közül választhatunk, előnyös lehet, mert adott esetben bizonyos műveletek végrehajtása az egyikükben könnyű lehet. Gyakran az a helyzet, hogy egy Minkowski-térben jól ismert fogalomnak twistor-kifejezéssel való közvetlen átírása először bonyolultnak és erőltettnak tűnik. Az ilyen bonyolult kifejezések azonban gyakran meglepően egyszerűvé írhatók át, egyszerűbbé, mint a Minkowski-térben, ahonnan származnak. Ezekben az átfogalmazásokban fő szerepet játszanak a twistorok holomorf függvényei.

Az említett jelenségre a legfrappánsabb példa talán a zérus nyugalmi tömegre vonatkozó szabad-téregyenletekkel kapcsolatban fordul elő. Ezek a következőképpen írhatók fel [25—28]

$$\nabla^{AA'} \Phi_{AB\dots L} = 0, \quad (3.1)$$

ahol a  $\Phi_{AB\dots L}$  ( $=\Phi_{(AB\dots L)}$ ) szimmetrikus spinornak  $n$  számú indexe van, a tér spinje  $\frac{1}{2}n$ , ha az egységeket úgy választottuk, hogy  $\hbar=1$  legyen. (3.1) pozitív frekvencia megoldásaira vonatkozólag a helicitás szigorúan véve

$$s = -\frac{1}{2}n. \quad (3.2)$$



A

$$\nabla^{AA'} \Theta_{A'B' \dots K'} = 0 \quad (3.3)$$

konjugált egyenletnek pedig — ahol a  $\Theta_{A' \dots K'} (= \Theta_{(A' \dots K')})$  vesszős indexeinek száma  $n'$  —

$$s = \frac{1}{2} n' \quad (3.4)$$

helicitású pozitív frekvenciás megoldása van.

Ha a spin zérus, akkor a

$$\nabla^a \nabla_a \Phi = 0 \quad (3.5)$$

másodrendű egyenletet kell használnunk. A (3.1) és (3.2) egyenletek a (2.15) és (2.16) konform átskalázás hatására invariánsak, amelyekben

$$\hat{\Phi}_{A \dots L} = \Omega^{-1} \Phi_{A \dots L}, \quad \hat{\Theta}_{A' \dots K'} = \Omega^{-1} \Theta_{A' \dots K'}, \quad (3.6)$$

ami (2.17)-ből azonnal következik. Hogy (3.5) konform módon invariáns legyen — görbült téridő esetén — (3.5)-öt  $(\nabla^a \nabla_a + R/6)\Phi = 0$  egyenlettel kell helyettesítenünk, ahol  $R$  a Ricci-skalár (és  $\hat{\Phi} = \Omega^{-1} \Phi$ ).

(3.1)-nek több érdekes speciális esete van. Ha  $n=1$ , akkor a  $\nabla^{AA'} \Phi_A = 0$  Weyl-féle neutrino-egyenletet kapjuk. Ha  $n=2$ , akkor (3.1) az  $F_{ab}$  tenzorra vonatkozó Maxwell-féle forrásmentes egyenletek spinor-változata lesz, ahol [29]

$$F_{AA' BB'} = \Phi_{AB} \varepsilon_{A' B'} + \varepsilon_{AB} \bar{\Phi}_{A' B'}. \quad (3.7)$$

$n=4$  esetén a [28]

$$K_{AA' BB' CC' DD'} = \Phi_{ABCD} \varepsilon_{A' B'} \varepsilon_{C' D'} + \varepsilon_{AB} \varepsilon_{CD} \bar{\Phi}_{A' B' C' D'}, \quad (3.8)$$

helyettesítéssel az Einstein-féle vákuum-egyenletek [29–30] gyenge-tér határesetének „mérték invariáns” változatát kapjuk, amelyben  $K_{abcd}$  lineárizált görbületi tenzort a Minkowski-tér egy mező-mennyiségeként definiáljuk. A fenti (3.8) kifejezés alakja miatt kielégíti a

$$K_{abcd} = K_{[ab][cd]} = K_{cdab}, \quad K_{[abc]d} = 0, \quad K^a{}_{bad} = 0$$

összefüggéseket. A (3.1) egyenlet pedig a linearizált

$$\nabla_{[a} K_{bc]de} = 0$$

Bianchi-féle azonosság lesz és a  $g_{ab} \rightarrow g_{ab} + \varepsilon h_{ab}$  metrika (ahol  $\varepsilon$  végtelen kicsi mennyiség és  $h_{ab} = h_{ba}$ ) egy kis változására vonatkozó integrálhatósági relációnak vehető, hogy az Einstein-féle vákuum-egyenletek kielégíthetők legyenek, amelyekben

$$\Phi_{ABCD} = \frac{1}{2} \nabla_{(A} \nabla_{B'} h_{CD)C' D'}.$$

Most az a feladatunk, hogy egy egyszerű módot találjunk (3.1) (valamint (3.3) és (3.5)) twistor-alakban való felírására. A közvetlen átírásnak kedvezőtlen következményei vannak. A terek végeredményben pontok függvényei, de a téridő pontjait nem könnyű twistor-formalizmussal előállítani. Szembenézhetnénk e nehézséggel, ha  $R^{z\beta}$ -val való (lásd (2.47)-et) leírást alkalmazzuk, de a (2.35) azonos összefüggések

(újabb) nehézség elé állítanak, különösen, ha  $R^{2p}$ -ra vonatkozó deriváltak fordulnak elő. Egy másik megoldás az volna, hogy a pont definiálására egy twistorpárt használunk, mint például (2.33)-ban a  $Z^z$  és az  $Y^z$  twistorokat, de nehézkesnek látszik, hogy még a legegyszerűbb típusú terek esetében is twistorok „kétpont” függvényeivel dolgozzunk — ezenkívül ezeknek a függvényeknek bizonyos differenciálegyenleteket kellene kielégíteniök, amelyek kifejezik azt a tényt, hogy csak a (2.33) kombinációtól függenek, nem pedig külön a  $Z^z$  és külön az  $Y^z$  twistortól. Ezek a megfontolások már az  $M^I$ -ben levő skalár terekre is vonatkoznak. De még hátra van  $\Phi_{A\dots L}$  spinorjellege (vagyis index-szerkezete), amin elmélkedni kellene, nem is említve a (3.1) specifikus téregyenletek kódolását.

Az  $M$ -ben levő konformisan invariáns fogalmak leírásának természetes eszközei azonban a twistorok. Már láttuk, hogy a (3.1) egyenletek konformisan invariánsak. Ez táplálja azt a reményünket, hogy (3.1)-nek twistorokkal való közvetlen átírásán kívül létezik valami jobb módszer. Ezzel kapcsolatban még valamit meg kell emlétenünk. Bár a  $\Phi_{A\dots L}$  tér (mező) a téridő négy dimenziójában mindenfelé definiálva van, a (3.1) téregyenletek elárulják, hogy az egész tér előállítható olyan komponensekből, amelyek egy háromdimenziós kezdeti hiperfelületen vannak definiálva. Tehát  $\Phi_{A\dots L}$  valójában csak *három* változós függvény. De a projektív twistortér három dimenziós (bár három komplex dimenziós). Így remélhető, hogy a  $\Phi_{A\dots L}$  tér leírására valószínűleg *egyetlen* twistor-változós homogén twistor-függvényekkel (amelyek holomorfok, azaz komplex analitikus függvényeknek kell lenniük; ellenkező esetben  $PT$ -t *hat* dimenziós térnek kellene tekinteni).

Kiderült, hogy ezek a remények beigazolódtak [31, 32]. (3.1) megoldásai megadhatók egy  $W_\alpha$  twistor holomorf függvényeinek segítségével, mely utóbbiak  $-n-2$  homogenitási fokúak:

$$f(\lambda W_\alpha) = \lambda^{-n-2} f(W_\alpha). \quad (3.9)$$

Ha egy (valós vagy komplex) téridő  $x^a$  helyvektorú  $X$  pontjában  $f(W_\alpha)$ -ból elő akarjuk állítani  $\Phi_{A\dots L}$ -et, akkor az  $X$ -hez tartozó (duális) spintérben — ami az  $X$ -en átmenő  $W_{\alpha\leftrightarrow}(W_A, -ix^{AA'}W_A) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ -twistorok terének fogható fel — egy kontur mentén integrálunk. Expliciten felírva:

$$\Phi(x^P)_{AB\dots L} = \frac{1}{2\pi i} \oint W_A W_B \dots W_L f(W_P - ix^{PP'} W_P) \Delta W \quad (3.10)$$

ahol

$$\Delta W = \varepsilon^{AB} W_A dW_B. \quad (3.11)$$

A (3.9) homogenitás biztosítja, hogy (3.10)-ben szereplő integrandus külső deriváltja (konstans  $x^a$  mellett) eltűnik. Ebből következik, hogy (3.10) igazi kontur-integrál, melynek értéke — a (zárt) görbe helyének folytonos változtatása esetén — nem változik, ha a görbe elkerüli azokat a helyeket, ahol  $f$  szinguláris. Nyilvánvaló, hogy  $f$ -nek vannak szinguláris helyei ( $f \neq 0$  esetén), mert negatív homogenitási fokú holomorf függvény. (Tehát  $f$  tartománya nem a duális twistor-tér, hanem annak egy alkalmas alhalmaza.) Felteszem, hogy  $f$  szingularitásai megfelelően helyezkednek el, tehát tényleg léteznek nem-triviális görbék, s ezek mozgása —  $x^a$  változásakor — megfelelően folytonosnak választható. (A valóságban sok és bizonyos értelemben



kielégítő ilyen  $f$  konstruálható.) Közvetlenül igazolható, hogy a (3.10)-zel definiált  $\Phi_{A\dots L}$  valóban kielégíti a (3.1)-et.

Hasonló módon állíthatjuk elő (3.3) megoldásait:

$$\Theta(x^P)_{A'B'\dots K'} = \frac{1}{2\pi i} \oint Z_{A'} Z_{B'} \dots Z_{K'} g(ix^{PP'} Z_{P'}, Z_{P'}) \Delta Z \quad (3.12)$$

ahol

$$g(\lambda Z^\alpha) = \lambda^{-n'-2} g(Z^\alpha) \quad (3.13)$$

(és  $\Delta Z = \varepsilon^{A'B'} Z_A dZ_B$ ), (3.5) megoldásai pedig —  $n=n'=0$  esetén — kifejezhetők akár (3.10), akár (3.12) alakjában:

$$\Phi(x^P) = \frac{1}{2\pi i} \oint f(W_{P'} - ix^{PP'} W_P) \Delta W \quad \text{vagy} \quad \frac{1}{2\pi i} \oint g(ix^{PP'} Z_{P'}, Z_{P'}) \Delta Z. \quad (3.14)$$

Ismétlem: a közvetlen igazolás igen egyszerű.

Most azt kérdezzük, hogy az így felépített terek mennyire általánosak és ehhez kapcsolódva: a (3.10), (3.12) és (3.14) formulákhoz létezik-e inverz kifejezés, amely a téridő mezőiből megadja  $f$  és  $g$  twistor-függvényeket. Néhány bevezető megjegyzést kell tennünk. Először is a (3.10), (3.12) és (3.14) formulákkal konstruált tereknek  $x^a$ -ban analitikusnak kell lenniük. Fizikai szempontból ez hátrányosnak tűnhetik, de úgy érzem, hogy ez valóban így van. Nem-analitikus tereket tetszőleges pontossággal megközelíthetünk analitikus terekkel és egy tér pozitív vagy negatív frekvenciás része (ha szabad hullámokat használunk) bizonyos tartományokban holomorf terek perem-értékeivel reprezentálhatók [33]. A hiperfüggvények elméletének szempontjából nézve még disztribúció-értékű terek is leírhatók holomorf terekkel. Könnyen előfordulhat, hogy a twistor-elmélet fejlett stádiumában a hagyományos térelméletben használt  $\delta$ -függvény helyett a hiperfüggvényeket fogják rendszeresen alkalmazni.\*

Ami (3.10) inverzésének előállítását illeti, észre kell vennünk, hogy sok olyan  $f$  van, ami ugyanazt a  $\Phi_{A\dots L}$ -et állítja elő. Mégpedig azért, mert ha  $f$ -et

$$f \mapsto f + h \quad (3.15)$$

-val helyettesítjük, ahol  $h$  a görbén belül vagy annak egyik oldalán nem-szinguláris, akkor a keletkező  $\Phi_{AB\dots L}$  tér változatlan lesz. Így (3.15) a twistor-függvényre vonatkozólag egyfajta „mérték szabadságot” ad, ami azonban nem hasonlít a mérték-transzformációk megszokott típusához, mert a „mérték csoport” függ a görbe helyétől. Nem várhatjuk, hogy (3.15)-nek csak egy inverze lesz, hanem olyan lesz, amely a választásra tág lehetőséget biztosít. Az elmélet legújabb eredménye\*\*, amely *B. D. Bramson* és *G. A. J. Sparling* közös munkája, úgy látszik, szép megoldását adja az inverz feladatnak, s benne az előbb említett választási lehetőség igen érdekes módon nyilvánul meg.

\* Köszönetemet fejezem ki *P. D. F. Ion*-nak, aki megismertetett a hiperfüggvény-elmélet alap-gondolataival.

\*\* Ez az eredmény akkor vált ismertté, mikor az előadások, amelyekre ez a cikk épült, már be-fejeződtek.

A megoldás előállítására céljából először alakítsuk át egy kissé (3.10)-et. Vegyük fel  $X$ -nél egy  $(o^A, \iota^A)$  spinor-bázist, ami a következőképpen van normálva:

$$o_A \iota^A = 1 \quad (3.16)$$

$U_\alpha$  és  $V_\alpha$  pedig legyen két, e bázisra vonatkozó  $X$ -en átmenő twistor:

$$U_\alpha \leftrightarrow (o_{A'} - ix^{AA'} o_A), \quad V_\alpha \leftrightarrow (\iota_{A'} - ix^{AA'} \iota_A). \quad (3.17)$$

És így (3.16) alapján (lásd (2.44)-et):

$$U_\alpha V_\beta I^{\alpha\beta} = 1 \quad (3.18)$$

$U_\alpha$  és  $V_\alpha$  magát az  $X$  pontot is meghatározza ( $X_{\alpha\beta} = 2U_{[\alpha} V_{\beta]}$  felhasználásával; lásd (2.33)-at, így a

$$\Phi_r = \Phi_{A...ED...L} o^A \dots o^E \iota^D \dots \iota^L \quad (r = 0, \dots, n) \quad (3.19)$$

komponenseket egyszerűen az  $U_\alpha$  és  $V_\beta$  függvényeinek tekinthetjük. Ha (3.10)  $o^A$ -ra és  $\iota^A$ -ra vonatkozó komponenseit akarjuk felírni, valóban azt kapjuk, hogy

$$\Phi_r(U_\alpha, V_\alpha) = \frac{1}{2\pi i} \oint \lambda^r f(\lambda U_\alpha - V_\alpha) d\lambda \quad (r = 0, \dots, n) \quad (3.20)$$

ahol  $W_\alpha = \lambda U_\alpha - V_\alpha$  és így  $W_A o^A = 1$ ,  $W_A \iota^A = \lambda$  és  $\Delta W = d\lambda$  ( $x^a$  rögzített értéke mellett). A (3.20) egyenlet egy olyan változata (3.10)-nek, ami teljes egészében twistor alakban van fölírva. (3.20)-at  $\Phi_r(U_\alpha, V_\alpha)$  definíciójának tekinthetjük, még akkor is, ha a (3.18) normálást elhagyjuk. Mivel ez a normálás egyszerűen úgy fogható fel, hogy  $X$ -be a konform faktort speciális módon választottuk (lásd (2.16)-ot), a hatása csak annyi, hogy (3.10)-be beépítettük a (3.6) skálázási tulajdonságot.

(3.20)-ból azonnal felírható, hogy

$$\frac{\partial \Phi_r}{\partial U_\alpha} + \frac{\partial \Phi_{r+1}}{\partial V_\alpha} = 0, \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi_r}{\partial U_{[\alpha} \partial V_{\beta]}} = 0 \quad (3.22)$$

és

$$U_\alpha \frac{\partial \Phi_r}{\partial U_\alpha} = -(r+1) \Phi_r, \quad V_\alpha \frac{\partial \Phi_r}{\partial V_\alpha} = (r-n-1) \Phi_r. \quad (3.23)$$

(3.21) és (3.22) a zérus nyugalmi tömegre vonatkozó (3.1) téregyenletek, illetve a hullámegyenlet twistor-analogonjának tekinthető, amelyek mellett a  $\Phi_r(-r-1, r-n-1)$  homogenitási fokát kimondó (3.23) relációknak is fenn kell állniuk [23]. Valójában a (3.21)–(3.23) pár egyenértékű a (3.1)–(3.6) párral.

A

$$\Phi(U_\alpha, V_\alpha) = \Phi_0(U_\alpha, V_\alpha) = \frac{1}{2\pi i} \oint f(\lambda U_\alpha - V_\alpha) d\lambda \quad (3.24)$$

mennyiségnek külön érdekessége van. Kielégíti a

$$\Phi(v U_\alpha, V_\alpha + \mu U_\alpha) = v^{-1} \Phi(U_\alpha, V_\alpha) \quad (3.25)$$



egyenletet, amelynek egyik következménye, hogy  $\Phi$  csak az  $X_{\alpha\beta} = 2U_{[\alpha}V_{\beta]}$  mennyiségen keresztül függ  $V_\alpha$ -tól (ami arra világít rá, hogy — a (3.16) normálástól eltekintve —  $\Phi$  nem függ  $r^A$ -tól). Geometriailag ez azt jelenti, hogy  $\Phi$  csak  $X$  ponttól, az  $X$ -beli konform skálától (a (2.16)-ban található  $\Phi = \Omega^{-1}\Phi$  összefüggés alapján) és az  $X$ -hez tartozó  $o^A$  spinortól (vagyis az  $X$ -en átmenő  $U_\alpha$  twistortól) függ. A  $\Phi$  mennyiség egy  $\mathcal{S}$  fényszerű hiperfelületen definiált,  $\Phi_{AB\dots L}$  térhez tartozó „fényszerű adatnak” tekinthető, ahol az  $X$  az  $\mathcal{S}$  tetszőleges pontja,  $U$  pedig az  $\mathcal{S}$  felület  $X$ -en átmenő alkotója (lásd a 6. ábrát).

A fényszerű adatot felhasználhatjuk, arra, hogy a  $\Phi_{AB\dots L}$  teret az egész  $\mathbf{M}$ -ben definiáljuk bizonyos explicit Kirchhoff-típusú integrálok segítségével [35, 34]. Úgy kapjuk meg a teret, hogy  $Y \in \mathbf{M}$  egy általános pontjában egy  $\Phi$ -t tartalmazó 2-felületen integrálást végzünk  $\mathcal{S}$  és az  $Y$  fénykúpja metszetén. Ennek eredményeképpen  $\mathcal{S}$  alkotói mentén megkapjuk  $\Phi$  egy jól definiált deriváltját, amit a

$$d\Phi = \frac{\partial \Phi}{\partial V_\alpha} dU_\alpha \quad (3.26)$$

1-alak megfelelően leír.

(3.25) alapján

$$\Phi(vU_\alpha, V_\alpha + \mu U_\alpha) = \Phi(U_\alpha, V_\alpha) \quad (3.27)$$

(3.22)-ből pedig

$$d\Phi = 0 \quad (V_\alpha \text{ rögzítve}). \quad (3.28)$$

A (3.28) egyenletből következik, hogy az

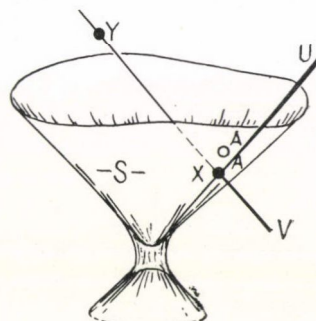
$$F(V_\alpha; P_\alpha, Q_\alpha) = \int_{P_\alpha}^{Q_\alpha} d\Phi \quad (3.29)$$

integrál változatlan marad, ha az integrálás útját  $P_\alpha$ -tól  $Q_\alpha$ -ig az  $U_\alpha$  térben folytonosan változtatjuk, feltéve, hogy  $\Phi$  szingularitásait kikerüljük.

Most már abban a helyzetben vagyunk, hogy meg tudjuk adni (3.10)-nek *Bramson*, *Sparling* és *jómagam* által levezetett inverzét, de a kifejezés teljes általánosítása és néhány topológiai és más részletkérdés még tisztázandó. Az eredmény a következő: ha  $P_\alpha$  és  $Q_\alpha$   $W_\beta$ -nak tetszőleges holomorf függvénye (de a szingularitások tartományait megfelelően választjuk), akkor az

$$F(W_\alpha, P(W_\beta), Q_\alpha(W_\beta)) \quad (3.30)$$

mennyiség a (3.10)-ben szereplő  $f(W_\alpha)$  helyett használható. Talán meglepő, hogy  $P_\alpha$  és  $Q_\alpha$  szabadon választható, de ez a (3.15)-ben megengedett szabad választás következménye. Ha (3.10)-et kiszámítjuk egy általános  $Y$  pontban és ebbe behelyettesítjük a (3.30) mennyiséget, akkor olyan kifejezést kapunk, ami a 6.6. ábrán látható szituációt (az  $Y$  fénykúpjának egy változó  $X$  pontjára vonatkozólag) írja le és megmutatható, hogy a korábban említett Kirchhoff-típusú integrállal ekvivalens. Az  $f$  twistorfüggvényt tehát afféle „félút” állapotnak foghatjuk fel a Kirchhoff-integrálban. Először van egy  $X$ -ben definiált terünk, majd a  $V_\alpha$ -ban definiált twistor-függvény, végül ismét a tér —  $Y$ -ban definiálva. Érdekes azt is megemlíteni, hogy a  $\Phi_{-1}$  mennyiség — amit úgy definiálunk, hogy (3.20)-ba  $r = -1$ -et helyettesítünk (ezt az esetet *Sparling*



6. ábra



már régebben megvizsgálta) —  $\Phi$  egy (negatív) explicit integráljának vehető, vagyis  $-\Phi = d\Phi_{-1}$  (rögzített  $V_\alpha$  mellett). Tehát:  $F(V_\alpha; P_\alpha, Q_\alpha) = \Phi_{-1}(P_\alpha, V_\alpha) - \Phi_{-1}(\Phi_\alpha, V_\alpha)$ .

A (3.30)-as képlet figyelemre méltóan általános. Közelebbről: az  $\mathbf{M}$ -en levő pozitív frekvenciájú szabad hullámokra megadható egy meghatározott kontúr-család és egy megfelelő előírás a  $P_\alpha(W_\beta)$  és  $Q_\alpha(W_\beta)$  függvényekre vonatkozólag; az így megadott  $f$  globálisan\* generálja a hullámot az egész  $\mathbf{M}$ -ben. A negatív frekvenciájú hullámokra hasonló eredményt kapunk, csak a kontúr-család lesz más (ellenkező csavarodású).  $f$  szingularitásainak általános elhelyezkedése mindkét esetben előírt, de a szingularitások általában nem pólusok. ( $f$  egyszerű pólusaiból az úgynevezett „0” terek lesznek, az alacsonyrendű pólusokból pedig az „algebrailag speciális” terek [31].

A fentebb mondottak alapján elfogadhatjuk, hogy egy tömeg nélküli szabad teret a legtermészetesebb módon úgy lehet twistorokkal leírni, hogy megfelelő negatív homogenitású, egy-twistorváltozós holomorf függvényt használunk, amelyben a homogenitás foka és a tér  $s$  helicitása közötti kapcsolatot a (3.2) és (3.4) kifejezések adják meg. Itt felhívjuk a figyelmet arra, hogy a helicitás fogalma a (2.8) egyenletben más alakban — mint az  $\frac{1}{2} Z^\alpha \bar{Z}_\alpha$  mennyiség — már előfordult. Bár első tekintetre e fizikai fogalom kétféle megjelenési formája igen különbözőnek tűnik, valójában nem így van. A 2. §-ban közölt tárgyalás egy egyetlen klasszikus, tömeg nélküli részecskére vonatkoztatható, míg az itt adott leírás egy egyrészecske-állapot kvantumos leírásának fogható fel.

Most a klasszikus leírásokról áttérünk a kvantumos leírásokra, ezért elfogadjuk a

$$[Z^\alpha, Z^\beta] = 0, \quad [\bar{Z}_\alpha, \bar{Z}_\beta] = 0, \quad [Z^\alpha, \bar{Z}_\beta] = \delta_\beta^\alpha \quad (3.31)$$

twistorokra vonatkozó (első) kvantálási szabályokat [32, 19], amire több okunk is van. (Az egységeket úgy választottuk, hogy  $\hbar = 1$  legyen.) Egyik ilyen ok annak észrevétele, hogy  $idZ^\alpha \wedge d\bar{Z}_\alpha = dp_\alpha \wedge dx^\alpha$  klasszikus összefüggés érvényes (bár csak a spin nélküli esetben), ami arra mutat, hogy  $-iZ^\alpha$  és  $\bar{Z}_\alpha$  kanonikusan konjugált változóknak tekintendők. Egy másik okot az általános relativitáselmélet szolgáltat [32, 5]. További ok, hogy — ha elfogadjuk a (3.31) kommutációs szabályokat, akkor — (2.11)-be való helyettesítésükkel olyan impulzus- és impulzuszórási komponenseket kapunk, amelyek kielégítik a lineáris és szögmozdulások generátoraira vonatkozó ismert kommutációs tulajdonságokat. Ezt az eredményt (2.3) és (2.4)-ből valamivel gyorsabban is megkaphatjuk, ha (3.31)-et a következőképpen írjuk fel:

$$[\omega^A, \omega^B] = 0, \quad [\omega^A, \pi_{B'}] = 0, \quad [\pi_{A'}, \pi_{B'}] = 0 \quad (3.32)$$

és

$$[\omega^A, \bar{\omega}^{B'}] = 0, \quad [\omega^A, \bar{\pi}_B] = \varepsilon_B^A, \quad [\pi_{A'}, \bar{\pi}_B] = 0 \quad (3.33)$$

konjugáltjaikkal együtt. Megjegyezzük, hogy (2.3), (2.4) vagy (2.11)-ben a tényezők sorrendje nem lényeges.

\* Ha  $\mathbf{M}$ -en tereket definiálunk, a Grgin-féle jelenséget [22] — ami abban áll, hogy a  $\Phi_{A\dots L}$  tér egy  $i^{n+2}$  faktorialis ugrik, valahányszor átmegy  $\mathcal{I}$ -n — megfelelő módon figyelembe kell venni. Mivel a twistorok 4 értékűek, e jelenség számbavétele (3.20)-ban automatikusan megtörtént.



Azonban (2.8)-at és ugyanígy (2.10)-et kissé módosítani kell, ha  $Z^\alpha$  és  $\bar{Z}_\alpha$  nem kommutálnak a szimmetrikusabb

$$s = \frac{1}{4} (Z^\alpha \bar{Z}_\alpha + \bar{Z}_\alpha Z^\alpha) \quad (3.34)$$

kifejezéssel.

A (3.32) és (3.33) kommutátorokból valójában egyértelműen következik (3.34), ha (2.3)-t és (2.4)-et (2.2)-be és (2.1)-be helyettesítjük (a tényezők sorrendjét illetően ezek egyikében sincs kétértelműség). Ha olyan függvényeket veszünk, amelyek csak  $Z^\alpha$  függvényei, akkor (3.31)-et a

$$\bar{Z}_\alpha \mapsto -\partial/\partial Z^\alpha \quad (3.35)$$

helyettesítéssel is ki tudjuk elégíteni. Ekkor (2.34) alakja

$$s = -\frac{1}{2} Z^\alpha \frac{\partial}{\partial Z^\alpha} - 1 \quad (3.36)$$

lesz. A  $Z^\alpha \partial/\partial Z^\alpha$  az Euler-féle homogenitási operátor, s ez (3.13)  $g(Z^\alpha)$  függvényére hatva a  $-n' - 2$  sajátértéket szolgáltatja. Ha ezt (3.36)-ba helyettesítjük,  $sg = \frac{1}{2} n' g$ -t kapjuk, ami megegyezik (3.4)-gyel. Hasonló a helyzet, ha csak  $W_\alpha$  függvényeivel foglalkozunk. Ekkor a

$$\bar{Z}_\alpha \mapsto W_\alpha, \quad Z^\alpha \mapsto \partial/\partial W_\alpha$$

helyettesítéseket alkalmazhatjuk és az

$$s = \frac{1}{2} W_\alpha \frac{\partial}{\partial W_\alpha} + 1 \quad (3.37)$$

kifejezést nyerjük. Ha ez (3.9)  $f(W_\alpha)$  függvényére hat, akkor  $f$  homogenitási fokából,  $-n - 2$ -ből  $sf = -\frac{1}{2} nf$  egyenletre jutunk, ami (3.2)-vel egyezik meg. Így a twistor-elmélet belső ellentmondás-mentességére egy további ellenőrzésünk van, ami az impulzus és impulzusmomentum twistor-kifejezései, valamint a twistorokra vonatkozó kommutációs szabályok és a szabad, tömeg nélküli részecske twistor-reprezentációja között teremt kapcsolatot.

A dolgok állása eddig nagyon kielégítő, azonban nem mindegyik fizikai tér tömeg nélküli és a tömeg nélküli terek sem mindig szabadok! Olyan kölcsönhatások leírására pedig, amelyekben tömeg nélküli terek szerepelnek, néha alkalmasabb volna a térmennyiségek helyett inkább potenciálokkal dolgozni. Amíg lehetőségeink egyváltozós twistorfüggvényekre korlátozódnak, úgy látszik, ezeket a dolgokat nem tudjuk leírni. Egy második twistorváltozó bevezetésével a keretek kibővítése lehetővé teszi tömeggel rendelkező terek, forrással keltett tömeg nélküli terek és tömeg nélküli terekre vonatkozó potenciálok beépítését. (Lásd a [19] irodalmi hivatkozást; és *C. J. S. Clarke* privát közlése.) Legyen ugyanis  $F(W_\alpha, Z^\alpha)W_\alpha$ -ban és  $Z^\alpha$ -ban külön-külön homogén, homogenitási fokuk pedig rendre  $-p-2$ , illetve  $-q-2$ :

$$F(\lambda W_\alpha, \mu Z^\alpha) = \lambda^{-p-2} \mu^{-q-2} F(W_\alpha, Z^\alpha) \quad (3.38)$$

ahol  $p$  és  $q$  nem-negatív egész számok. Definíáljuk a

$$\Phi(x^a)_{C\dots GM'\dots R'} = \frac{1}{(2\pi i)^2} \oint \underbrace{W_C \dots W_G}_p \underbrace{Z_{M'} \dots Z_{R'}}_q F(W_{A'} - ix^{AA'} W_{A'}, ix^{AA'} Z_{A'}, Z_{A'}) \Delta W Z \quad (3.39)$$

teret (3.10)-zel analóg módon, amelyben

$$\Delta W X \dots Z \text{ jelentése általában } \Delta W \wedge \Delta X \wedge \dots \wedge \Delta Z \quad (3.40)$$

(lásd (3.11)-et). A térnek  $p$  számú szimmetrikus vesszőtlen spinor-indexe és  $q$  számú szimmetrikus vesszős indexe van. Az egyenlet, amit  $pq \neq 0$  esetén kielégít, a (3.39) kifejezés alapján most egyszerűen

$$\nabla^{CM'} \Phi_{CD\dots GM'N'\dots R'} = 0. \quad (3.41)$$

Ha akár  $p$ , akár  $q$  eltűnik, a térre vonatkozólag nincs differenciális kényszer. A (2.39) kontur nem szükségképpen szorzata egy  $W_{A'}$ - és egy  $Z_{A'}$ -térbeli kontúrnak, hanem egy kétdimenziós kontúrféleség a szorzattérben. Figyeljük meg, hogy (3.39)  $F$ -nek csak azoktól az értékeitől függ, amelyekre vonatkozólag  $W_a Z^a = 0$ .

A (3.41) egyenlet különböző formái különböző szerepeket játszanak az elméleti fizikában. Ha például  $p=q=1$ , akkor a  $\Phi_a$ -t (vagyis  $\Phi_{AA'}$ -t) a klasszikus Maxwell-elméletből ismert töltésáram-vektorként használhatjuk, s ekkor (3.41) a töltésmegmaradási törvény. De használható  $\Phi_a$  elektromágneses potenciálként is (3.41), ekkor a Lorenz-féle mértékfeltétel. 1-nél nagyobb spinű tömeg nélküli terekre vonatkozólag is használható  $\Phi_{C\dots R'}$  potenciál gyanánt, ha a (3.41) mértékfeltétel teljesül [27]. A (3.41) feltétel nagyobb spinű, irreducibilis, *töltött* terek esetében is fontos szerepet játszik. Mert tegyük fel, hogy a  $\Phi_{C\dots R'}$  spinor  $p$  számú vesszőtlen és  $q$  számú vesszős indexre vonatkozólag szimmetrikus és eleget tesz a (3.41) feltételnek. Tegyük fel azt is, hogy

$$(\square + m^2) \Phi_{C\dots GM'\dots R'} = 0, \quad (3.42)$$

ahol  $\square = \nabla_a \nabla^a$ . Ekkor a

$$\psi_{D\dots GL'M'\dots R'} = \nabla_{L'}^C \Phi_{CD\dots GM'\dots R'} \quad (3.43)$$

tér szintén kielégíti (3.41)-et és (3.42)-t, továbbá (3.41) alapján: azonkívül, hogy szimmetrikus  $p-1$  számú vesszőtlen indexére, szimmetrikus  $q+1$  számú vesszős indexére vonatkozólag is. És megfordítva, (3.42) alapján

$$\frac{m^2}{2} \Phi_{CD\dots GM'\dots R'} = \nabla_C^{L'} \psi_{D\dots GL'M'\dots R'}. \quad (3.44)$$

A  $\Phi_{C\dots R'}$ , és a  $2^{1/2} m^{-1} \psi_{D\dots R'}$  terek — amelyek között a kapcsolatot a (3.43) és (3.44) összefüggés fejezi ki — együtt egy  $p+q$  spinű részecske Dirac-féle [25, 26] leírását adják. Ezzel ekvivalens eredményre jutunk, ha *csak* a  $\Phi_{C\dots R'}$ -t használjuk ( $p>0$  esetén), ami kielégíti (3.41) és (3.42)-t. (Dirac csak elsőrendű egyenleteket keresett.) Ugyanezt az eredményt kapjuk akkor is, ha *csak*  $\psi_{D\dots R'}$ -t használjuk — vagy pedig bármelyiket azon  $p+q+1$  számú tér közül, amelyeket a  $\Phi_{CR'}$ -ből úgy kaphatunk, hogy a (3.43) és (3.44) jobb oldalán szereplő operátorokat egymás után alkalmazzuk. A (3.43)-ban szereplő operátor egy lépéssel visz tovább bennünket a  $q$ -k növekvő és a  $p$ -k csökkenő sorozatában, míg a (3.44)-ben szereplő operátor (az  $\frac{1}{2} m^2$  tényezőtől



eltekinve) eggyel megint visszaléptet a sorozatban. Érdemes azt is megemlíteni, hogy ha  $m=0$ , akkor a  $\Phi_{C\dots R'}$  tértől kiindulva csak (mindkét irányban) kifelé haladhatunk. Ha megint visszatérünk, nullát kell kapnunk (lásd (3.44)-et. Ebben az esetben azokat a „tereket”, amelyekben vesszős és vesszőtlen indexek egyaránt előfordulnak, a két szélén elhelyezkedő térre vonatkozó potenciáloknak tekintjük (hogy az irreducibilitás biztosítva legyen). A sorozat két végén levő térre vonatkozó téregyenleteket (3.1) és (3.3) adja (ha pedig  $p=q=0$ , akkor (3.5) adja).

Most tegyük fel, hogy  $\Phi_{C\dots R'}$ -t (3.39) szerint  $F(W_\alpha, Z^\alpha)$  generálja és  $\psi_{D\dots R'}$  és  $\Phi_{C\dots R'}$  között a (3.43) kapcsolat áll fenn. Könnyen igazolható, hogy a  $\psi_{D\dots R'}$ -t (3.39) szerint generáló twistor-függvény

$$iI^{\alpha\beta}W_\alpha \frac{\partial F}{\partial Z^\beta} \quad (3.45)$$

alakú. Ehhez hasonlóan, ha a (3.44) operátor (amelyben a vesszős indexeket egy indexszé vonjuk össze)  $\Phi_{\dots}$ -re hat, akkor a keletkező teret a

$$-iI_{\alpha\beta}Z^\alpha \frac{\partial F}{\partial W_\beta} \quad (3.46)$$

twistor-függvény generálja. Ha először a (3.43)-ban szereplő operátort, majd utána a (3.44)-ben szereplőt alkalmazzuk, akkor a  $-\frac{1}{2} \square$  műveletet kapjuk eredményül. Így a twistoros D'Alembert-operátor a következőképpen definiálható:

$$\square = -2 \left( I_{\alpha\beta}Z^\alpha \frac{\partial}{\partial W_\beta} \right) \circ \left( I^{\alpha\sigma}W_\sigma \frac{\partial}{\partial Z^\alpha} \right). \quad (3.47)$$

(A tényezők itt (2.45) alapján kommutálnak). Ha azt akarjuk tehát, hogy  $\Phi_{C\dots R'}$  kielégítse (3.42)-t (és ugyanakkor  $\square$  definíciója (3.47)), akkor ennek elégséges feltétele

$$(\square + m^2)F = 0. \quad (3.48)$$

Most előállítottuk a tömeggel rendelkező terek egy reprezentációját kétváltozós twistor-függvényekkel, amely kielégíti (3.48)-at; a  $-p-2$  és a  $-q-2$  homogenitási fokok, valamint a  $j$  spin közötti összefüggést a

$$j = \frac{1}{2}(p+q) \quad (3.49)$$

kifejezés írja le. Ez a reprezentáció nem rendelkezik (3.10) minden előnyével, a tömeg nélküli tér esetében ugyanis az  $f$  függvény nem köteles differenciálegyenletet kielégíteni. Itt (3.48)-at meg kell oldanunk. Az is igaz viszont, hogy vannak módszerek, amelyekkel elő lehet állítani (3.48) megoldásait, akkor is, ha *tetszőleges* kétváltozós twistor-függvényekből indulunk ki. Az első ilyen eljárást A. Hodges [37] dolgozta ki. Ezt G. Sparling újabban egyszerűsítette, eredménye a következő:

$$F(W_\alpha, Z^\alpha) = \oint h(\lambda, \mu) G(W_\alpha + \lambda I_{\alpha\beta}Z^\beta, \quad Z^\alpha + \mu I^{\alpha\beta}W_\beta) d\lambda \wedge d\mu,$$

ahol  $G$  tetszőleges (de esetleg homogén),  $h$  pedig a

$$2\partial^2 h / \partial \lambda \partial \mu = m^2 h$$

egy specifikus megoldása (amilyen például  $\exp. \{2^{-1/2} m(\lambda + \mu)\}$  vagy még inkább egy alkalmas Hankel-függvény), és ebből a (3.48) egyenlet automatikusan következik.

Itt természetesen felmerülhet az a kérdés, hogy — összehasonlítva egy tömeggel bíró tér tömegét és spinjét egy tömeggel rendelkező klasszikus részecske tömegével és spinjével — létezik-e a (3.34), (3.36) és (3.37)-tel analóg kifejezés. Mivel most két twistorváltozónk van,  $W_\alpha$  és  $Z^\alpha$ , kénytelenek vagyunk olyan rendszerekkel foglalkozni, amelyek impulzusa és impulzusmomentuma két részből tevődik össze: a  $W_\alpha$ -val, illetve  $Z^\alpha$ -val leírt, zérus nyugalmi tömegű részecskékből adódó egy-egy részből. Egy jövőbe mutató, időszerű impulzussal bíró általános rendszer  $p_a$  impulzusa és  $M^{ab}$  impulzusmomentuma (több módon) kifejezhető két, tömeg nélküli részecske impulzusának és impulzusmomentumának összegével:

$$p_a = p_a^1 + p_a^2, \quad M^{ab} = M^{ab1} + M^{ab2}. \quad (3.50)$$

Itt  $(p_a^1, M^{ab1})$  és  $(p_a^2, M^{ab2})$  (2.3), (2.4) és (2.5) szerint egy-egy twistorból van felépítve. Az első twistort nevezzük  $Z^\alpha$ -nak, a másodikat  $\bar{W}_\alpha$ -nak; az egész rendszerre vonatkozó  $A^{\alpha\beta}$  impulzusmomentum-twistort a következőképpen definiáljuk:

$$A^{e\sigma} \leftrightarrow \begin{pmatrix} -2i\mu^{RS} & P_S^R \\ P_R^S & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.51)$$

ahol

$$M^{AA'BB'} = \mu^{AB} \varepsilon^{A'B'} + \varepsilon^{AB} \bar{\mu}^{A'B'} \quad \text{és} \quad \mu^{AB} = \mu^{BA}. \quad (3.52)$$

Ekkor az

$$A^{\alpha\beta} = 2Z^{(\alpha} I^{\beta)\gamma} \bar{Z}_\gamma + 2\bar{W}^{(\alpha} I^{\beta)\gamma} W_\gamma \quad (3.53)$$

kifejezésben a jobb oldalon álló két tag a két összetevődő, tömeg nélküli részecske impulzusmomentum-twistora. (Hasonló kifejezést kapnánk egy tetszőleges, de véges számú részből összetett rendszer esetében is.)

Mivel  $I^{\alpha\beta}$  antiszimmetrikus, (3.53)-ban a tényezők sorrendje nem lényeges, így ebben ((3.53) kvantum-változatát véve)

$$[Z^\alpha, \bar{Z}_\beta] = \delta_\beta^\alpha, \quad [W_\alpha, \bar{W}^\beta] = -\delta_\alpha^\beta \quad (3.54)$$

és az összes többi kommutátor eltűnik (lásd (3.31)-et. Az impulzusmomentumra és az impulzusra vonatkozó kommutációs relációkat twistorokkal így írhatjuk fel:

$$\begin{aligned} [A^{\alpha\beta}, A^{e\sigma}] &= 2A^{\alpha(e} I^{\sigma)\beta} + 2A^{\beta(e} I^{\sigma)\alpha}, \\ [A^{\alpha\beta}, \bar{A}_{e\sigma}] &= 4\delta_{(e}^{(\alpha} I_{\sigma)\gamma} A^{\beta)\gamma} = 4\delta_{(e}^{(\alpha} I^{\beta)\gamma} \bar{A}_{\sigma)\gamma}, \end{aligned} \quad (3.55)$$

amelyek (3.53) és (3.54)-ből közvetlenül következnek. (Ugyanezek az összefüggések  $p_{AA'}$ -vel és  $\mu^{AB}$ -vel is felírhatók:

$$\begin{aligned} [p_{AA'}, p_{BB'}] &= 0, \quad [p_{AA'}, \mu^{BC}] = i\varepsilon_A^{(B} p_{A'}^{C)}, \\ [\mu^{AB}, \mu^{CD}] &= i\mu^{A(C} \varepsilon^{D)B} + i\mu^{B(C} \varepsilon^{D)A}, \quad [\mu^{AB}, \bar{\mu}^{C'D'}] = 0. \end{aligned}$$



(3.55)-ben a második kommutátorra vonatkozó két kifejezés egyenlő egymással, mert az impulzusmomentum twistora a következő szimmetriákkal rendelkezik:

$$I_{\alpha\gamma} A^{\beta\gamma} = \bar{A}_{\alpha\gamma} I^{\beta\gamma}, \quad A^{\alpha\beta} = A^{\beta\alpha} \quad (3.56)$$

amelyek az

$$A^{\alpha\beta} = 2E_{\gamma}^{(\alpha} I^{\beta)\gamma} \quad (3.57)$$

kifejezés alakjából származnak, ahol  $E_{\beta}^{\alpha}$  hermitikus, azaz

$$\bar{E}_{\beta}^{\alpha} = E_{\beta}^{\alpha}. \quad (3.58)$$

Felírhatjuk, hogy

$$E_{\beta}^{\alpha} = Z^{\alpha} \bar{Z}_{\beta} + W_{\beta} \bar{W}^{\alpha} = \bar{Z}_{\beta} Z^{\alpha} + \bar{W}^{\alpha} W_{\beta} \quad (3.59)$$

(lásd (3.54)-et) és így (3.53) kielégül. Ha  $E_{\beta}^{\alpha}$ -hoz hozzáadunk egy fődiagonálisban levő tagot, (3.57) ( $I^{\alpha\beta}$  antiszimmetriája miatt) nem változik meg, ezért a (3.59)-ben szereplő két tag tényezőinek relatív sorrendje más is lehet, bár így a szimmetria kisebb lesz. Vagy pedig:  $E_{\beta}^{\alpha}$  spurja teljesen elhagyható és (3.57)-ben  $E_{\beta}^{\alpha}$  helyett az

$$E_{\beta}^{\alpha} - \frac{1}{4} \delta_{\beta}^{\alpha} E_{\gamma}^{\gamma} \quad (3.60)$$

menyiséget használhatjuk. A (3.60) kifejezés jelentősége abban rejlik, hogy 15 független komponense ugyanúgy generálja az  $SU(2,2)$  — vagyis a konform csoport — Lie-algebráját, mint ahogyan  $A^{\alpha\beta}$  (és  $\bar{A}_{\alpha\beta}$ ) 10 független komponense a Poincaré-csoport Lie-algebráját generálja. Az  $E_{\beta}^{\alpha}$ -ra vonatkozó kommutációs relációk (3.54) alapján a következők

$$[E_{\beta}^{\alpha}, E_{\sigma}^{\rho}] = \delta_{\sigma}^{\alpha} E_{\beta}^{\rho} - \delta_{\beta}^{\rho} E_{\sigma}^{\alpha} \quad (3.61)$$

(ami  $U(2,2)$  Lie-algebráját adja meg). A (3.60)-ra vonatkozó kommutációs relációkat egyszerűen úgy kaphatjuk meg, hogy (3.61)-ben mindegyik  $E_{\beta}^{\alpha}$ -t  $E_{\beta}^{\alpha} - \frac{1}{4} \delta_{\beta}^{\alpha} E_{\gamma}^{\gamma}$ -val helyettesítjük. Ugyanezekből következnek az  $A^{\alpha\beta}$ ,  $\bar{A}_{\alpha\beta}$ -ra vonatkozó kommutációs relációk is.

Most már kiszámíthatók az  $m^2 = p_a p^a$  négyzetes tömeg és a  $-S_a S^a m^{-2}$  négyzetes teljes spinoperátorok (utóbbiban  $S_a$ , most a zérustól különböző tömeg esetében, a (2.2)-ben szereplő Pauli—Lubanski-vektor). Azt kapjuk, [19] hogy

$$m^2 = 2(I_{\alpha\beta} Z^{\alpha} \bar{W}^{\beta})(I^{\rho\sigma} \bar{Z}_{\rho} W_{\sigma}) \quad (3.62)$$

és\*

$$-S_a S^a m^{-2} = j(j+1) + W_{\alpha} Z^{\alpha} \bar{W}^{\beta} \bar{Z}_{\beta}, \quad (3.63)$$

ahol

$$2j = Z^{\alpha} \bar{Z}_{\alpha} - \bar{W}^{\alpha} W_{\alpha} = \bar{Z}_{\alpha} Z^{\alpha} - W_{\alpha} \bar{W}^{\alpha} = Z^{\alpha} \bar{Z}_{\alpha} - W_{\alpha} \bar{W}^{\alpha} - 4. \quad (3.64)$$

A vizsgálataink tárgyát képező  $F(W_{\alpha}, Z^{\alpha})$  függvény valóban saját állapota a (3.62) operátornak és  $W_{\alpha} Z^{\alpha} h$  alakú együttható függvényei a (3.63) operátornak is. (Emlékeztetünk arra, hogy (3.39) a  $(W_{\alpha}, Z^{\alpha})$  térnek csak arra a tartományára vonatkozik, ahol  $W_{\alpha} Z^{\alpha} = 0$ .) Ez (3.47) és (3.38) alapján (3.48)-ból következik (ahol  $\bar{W}^{\alpha} \rightarrow \partial/\partial W_{\alpha}$  és

\* Köszönettel tartozom P. Tod-nak, hogy rendelkezésemre bocsátotta ezt a képletet (valamint Z. Perjés-nek, aki korábban már megtalálta annak klasszikus változatát).

$\bar{Z}_\alpha \rightarrow -\partial/\partial Z^\alpha$ ). (3.62) esetében a sajátérték — (3.48)-nak megfelelően — éppen a tömeg négyzete. (3.63) esetében a helyes  $j(j+1)$  korrekt kvantummechanikai kifejezést kapjuk és a  $j$  spin-operátor sajátértéke, mint (3.49)-ben,  $\frac{1}{2}(p+q)$ . Mindez —  $F$  homogenitási fokai alapján — a  $Z^\alpha \bar{Z}_\alpha F = (p+2)F$  és  $W_\alpha \bar{W}^\alpha F = -(q+2)F$  egyenletekből következik. Így a twistorokra vonatkozó kvantálási szabályok ellentmondásmentességére újabb sikeres ellenőrzésünk van. (Figyelmet érdemel a twistorelméletnek előnye a hagyományos elmélettel szemben, azaz, hogy a  $j$  operátor kifejezése igen egyszerű.) Bár az  $E_\beta^\alpha$ -ban szereplő operátorok értelmezését tovább lehetne folytatni, de e tárgyra nem szándékozunk itt bővebben kitérni.

A tömeggel rendelkező rendszereket mindmáig — bizonyos értelemben — két (vagy több) tömeg nélküli rendszerből összetettnek tekintettük. A két tömeg nélküli rendszerre való felbontás azonban, mint korábban röviden már megjegyeztük, egyáltalában nem egyértelmű. Ennek a nem-egyértelműségnek a vizsgálata érdekes lehet, mert a  $Z^\alpha$ ,  $\bar{Z}_\alpha$ ,  $W_\alpha$  és  $\bar{W}^\alpha$  között fennálló,  $A^{\alpha\beta}$ -t változatlanul hagyó transzformációs csoport úgy tekinthető, mint egyfajta *belső szimmetria-csoport*, amely egy tömeggel rendelkező részecskére vonatkozik. Nem nehéz megmutatni, hogy  $U(2)$  az a csoport, amelynek hatására  $E_\beta^\alpha$  (3.59) kifejezése invariáns (utóbbi most tulajdonképpen klasszikus kifejezésnek tekinthető). Az a csoport pedig, amelynek hatására  $A^{\alpha\beta}$  invariáns, csak egy kissé nagyobb,

$$Z^\alpha \mapsto Z^\alpha + \lambda I^{\alpha\beta} W_\beta, \quad W_\alpha \mapsto W_\alpha - \bar{\lambda} I_{\alpha\beta} Z^\beta$$

típusú transzformációkból és ezek konjugáltjaiból áll. E csoport nem más, mint

$$\overline{SU(2) \times E(2)},$$

amelyben  $E(2)$  a sík euklideszi mozgáscsoportja és  $\sim$  kétszeres fedést jelent\*.

Még sok mindent lehetne mondani az  $A^{\alpha\beta}$  impulzusmomentum twistorról, például a Coulomb-típusú terekkel és utóbbiak forgó megfelelőivel, a Kerr-típusú terekkel való kapcsolatáról. Az olvasó rövid ismertetést talál ezekre vonatkozólag a [19] irodalmi hivatkozásban.

#### 4. Twistor-diagramok

A twistorelmélet egyik legfontosabb célja az, hogy a terek kvantálására egy másik közelítést adjon. Teljes elmélet még nem áll rendelkezésünkre, a részeredményeket elsősorban a tömeg nélküli részecskékre és más fontos kifejezésekre (pl. a töltésintegrálokra stb.) vonatkozó Feynmann-féle gráfok közvetlen átírásával nyertük. A kapott kifejezéseket általában — bizonyos jóldefiniált szabályok szerint — diagramokkal ábrázolhatjuk és bár ezeket a szabályokat meglehetősen ideigleneseknek kell tekintenünk, úgy látszik, hogy új felismeréshez vezetnek a részecskék közötti kölcsönhatások valószínű természetéről. Esetleg a twistor-diagramok, vagy azok valamilyen

\* Z. Perjés [50] megállapította, hogy az  $A^{\alpha\beta}$ -t változatlanul hagyó csoport, amely nem két, hanem három twistorból és ezek (konjugáltjaiból áll, (legalábbis lokálisan) izomorf a 15 paraméteres „inhomogén  $U(3)$ ”-mal. Azt is ő állapította meg, hogy annak 14 paraméteres „inhomogén  $SU(3)$ ” alcsoportja (egyszeresen) tranzitív módon hat az  $A^{\alpha\beta}$ -t alkotó twistor-hármas térre.



változata, szolgáltatja majd a spinhálózatok áhított általánosítását, amit az 1. §-ban már említettünk.

Megadom előbb a twistor-diagramokra vonatkozó ideiglenes szabályokat, majd megmutatom, hogy néhány egyszerű folyamatot hogyan lehet leírni ilyen diagramokkal. Maguk a diagramok fekete és fehér\* pontokból állnak, amelyeket *csúcspontok*nak nevezünk. Ezeket (egy vagy több) vonaldarab köti össze, amelyeknek *él* a nevük. Mindegyik él vagy egy fehér és egy fekete csúcspontot köt össze (belső él) vagy egyik vége szabad (külső él). Minden élt — rendszerint egész számmal — megszámozzunk. A szabad éleket betűvel jelöljük, ezek *rögzített* twistorokat reprezentálnak. Maguk a csúcspontok változó twistorokat jelentenek, amelyekre integrálni kell. A fekete csúcspontok  $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$  valenciájú  $Z^\alpha, Y^\alpha, \dots$  twistorokat, a fehér csúcspontok  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$  valenciájú  $W_\alpha, V_\alpha, \dots$  twistorokat jelölnek.

Az egész diagram zárt differenciál-kifejezést definiál és igyekszik azt is jelezni, hogy ezt a kifejezést milyen kontúr mentén kell integrálni. A fellépő differenciálok\*\* a csúcspontokra vonatkozólag

$$\begin{aligned} DZY \dots WV \dots &= d^4 Z \wedge d^4 Y \wedge \dots \wedge d^4 W \wedge d^4 V \wedge \dots \\ &= dZ^0 \wedge dZ^1 \wedge dZ^2 \wedge dZ^3 \wedge dY^0 \wedge \dots \wedge dW_0 \wedge \dots \wedge dW_3 \wedge dV_0 \wedge \dots \\ &= \left( \frac{1}{24} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta} dZ^\alpha \wedge dZ^\beta \wedge dZ^\gamma \wedge dZ^\delta \right) \wedge (\dots) \wedge \dots \end{aligned} \quad (4.1)$$

A (4.1.) mindegyik éltre vonatkozólag egy faktorial szorzódik, amelyet a következőképpen határozunk meg: az éltre írt számhoz hozzáadjuk az él  $k$  multiplicitását; ezt az eredményt jelöljük  $r$ -rel. Ha  $r$  pozitív egész szám, akkor a faktor

$$\frac{(-1)^{r-1}(r-1)!}{(2\pi i)^{k+1}(W_\alpha Z^\alpha)^r}, \quad (4.2)$$

ahol  $W_\alpha$  és  $Z^\alpha$  az él két végével reprezentált twistort jelöl.

Ha pedig  $r$  bármilyen zérustól különböző negatív egész szám, akkor a

$$(2\pi i)^{-k}(W_\alpha Z^\alpha)_r, \quad (4.3)$$

általánosítást használjuk, amelyben

$$(x)_r = -\frac{1}{2\pi i} \Gamma(r)(-x)^{-r}. \quad (4.4)$$

Megjegyezzük, hogy (4.4) kielégíti a

$$\frac{d(x)_r}{dx} = (x)_{r+1} \quad (4.5)$$

\* Mivel fekete táblán a színek szerepe felcserélődik, alkalmasabb a csúcspontokat a „petty”, illetve „karika” szavakkal megkülönböztetni.

\*\* A [19] és [32] irodalmi hivatkozásokban ettől kissé eltérő differenciál-kifejezéseket használunk. Ezek kapcsolata (4.1)-vel a (4.8), (4.9) és (4.10) képletekben található.

összefüggést. Ha  $r$  nem-pozitív egész szám, a faktor

$$\frac{(W_\alpha Z^\alpha)^{-r}}{(2\pi i)^k (-r)!} \quad (4.6)$$

kell, hogy legyen. De ha a (4.6) faktort használjuk, akkor a használandó kontúr természetesen is lényegesen különböző lesz. Ezt a kérdést röviden kifejtjük. A nem-pozitív egész számú  $r$  esetének tárgyalására különböző eljárások léteznek. Így például (4.3)-ra alkalmazhatunk egy limitáló eljárást, vagy használhatunk logaritmikus kifejezéseket. Ezeket a módszereket alkalmazták régebbi munkákban [19, 32], de ezekkel itt nem foglalkozunk. A dolog lényege az, hogy ellentmondásmentes parciális integrálást kell végrehajtanunk egy olyan folyamatban, amely  $r$  értékét 1-ről 0-ra csökkenti. A (4.6) kifejezésre vonatkozólag később ezt egy kissé részletesebben megvizsgáljuk. A twistor-diagrammal ábrázolt differenciálkifejezés definícióját most kiegészítjük egy  $2\pi i$  faktorról\*, a nevezőben mindegyik szabad végre vonatkozólag.

Vannak (ideiglenes) szabályok, amelyeket azért alkalmazunk általában, hogy a diagramok „helyesen megrajzoltak” legyenek. Ilyen például az, hogy a közös csúcspontba futó éleken levő számok összege zérus kell, hogy legyen. Másodszor: minden csúcspontba pontosan négy élnek kell találkoznia, a többszörös éleket multiplicitásuknak megfelelően számolva. (Figyeljük meg, hogy ez azt jelenti, hogy egy él multiplicitása legfeljebb 4 lehet.) Egyes esetekben e szabály szigorúsága csökkenhet, (de általában csak olyan élekre vonatkozólag, amelyekre  $r$  nem-pozitív egész szám), amikor az előbbi két szabályt az a kikötés helyettesíti, hogy mindegyik csúcspontban az élek „ $r$  értékeinek” összege 4 kell, hogy legyen. Végül teljesülniök kell azon szabályoknak is, hogy minden külső él csak egyszeres lehet, és (általában) két csúcspontot különböző élnek nem köthetnek össze.

Ezek a szabályok az explicit, konformisan invariáns diagramok esetében érvényesek. Ha azonban a konform invarianciát nem követeljük meg, akkor más típusú faktorok, nevezetesen

$$Z^\alpha Y^\beta I_{\alpha\beta} \quad \text{vagy} \quad W_\alpha V_\beta I^{\alpha\beta} \quad (4.7)$$

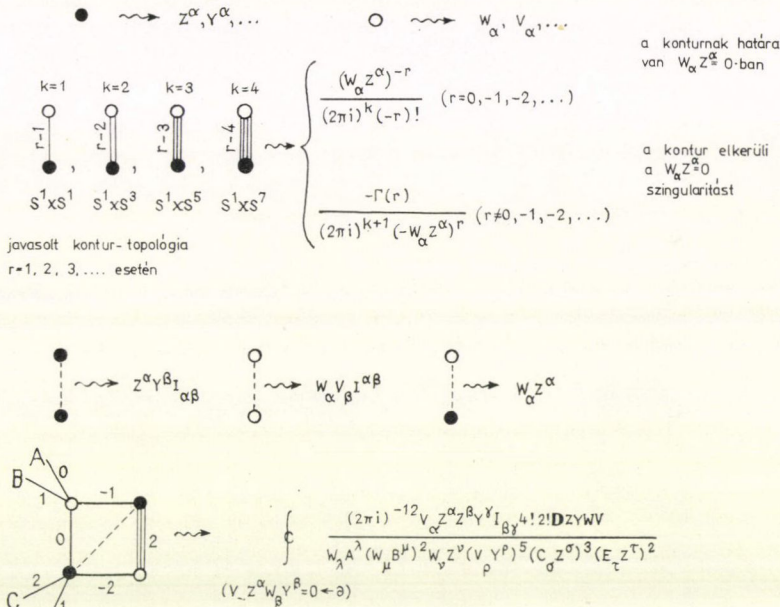
jelenhetnek meg. Ezeket a (számlálóban előforduló) — a szóban forgó csúcspontokat összekötő — faktorokat pontozott vonallal fogjuk jelölni (mind a két csúcspont fekete, ha (4.7)-ben az első kifejezés érvényes, és mind a kettő fehér, ha a második van érvényben). Ha a (4.7)-ben található kifejezések négyzete szerepel a számlálóban, akkor ugyanazt a csúcspárt összekötő két különböző pontozott vonalat használhatunk; ha a faktor harmadik hatványon fordul elő, akkor három különböző pontozott vonalat stb. Bevezethetünk (4.2)-vel analóg pólus-tagokat, vagy (4.3)-mal analóg elágazó szingularitásokat. Szükség van ezekre a kifejezésekre a tömeggel rendelkező terekre vonatkozó Hodges-formulában, de itt nem vezetjük be. Abba a szabályba, hogy minden csúcspontban négy vonalnak kell összefutnia (a multiplicitásokat is beszámítva), a pontozott vonalak nem értendők bele. (Az említett szabály a szinguláris helyek topológiájával van kapcsolatban, a (4.7) faktorok pedig nem-szingulárisak.) Kissé helyesbíteniünk kell azt a szabályt, amely a számok összeadására vonatkozik az

\* A több helyen megjelenő  $2\pi i$  faktort úgy választottuk, hogy az egyszerű diagramoknak megfelelő kifejezések viszonylag szépek legyenek. Kevés hiányzik már ahhoz, hogy e faktorok elméleti igazolása szabatos legyen.



egyes csúcspontoknál mégpedig úgy, hogy mindegyik pontozott vonal — 1-gyel járul a csúcspontnál kialakuló összeghez. (Erre a szabályra azért van szükség, hogy elő tudjuk állítani a —4 homogenitási fokot a csúcspontot reprezentáló változó twistorban; (4.7)-ben a homogenitási fok ugyanis +1.) A számlálóban fellépő  $WZ$  skalárszorzat-faktorok jelölésére — amelyek (4.6)-tal ellentétben nem szerepelnek a kontúr elhelyezkedésében — megengedjük *ellenkező* színű csúcspontokat összekötő pontozott vonalak használatát. A diagramokra vonatkozó alapszabályok összefoglalását a 7. ábrán láthatjuk.

Most rátérünk arra a kérdésre, hogy milyen helyen legyen a kontúr, amely mentén ezt a differenciál-kifejezést integrálnunk kell. Ha feltesszük, hogy az „ $r$ -értékek”



7. ábra

mindegyik élre vonatkozólag pozitívok (vagy pedig nem egész számok), akkor a kontúr valamilyen zárt (vagyis határnélküli kompakt)  $4v$ -dimenziós felület a csúcspontoknak megfelelő  $Z^\alpha, Y^\alpha, \dots, W_\alpha, V_\alpha, \dots$   $v$  darab twistor szorzatterében. De hogy hogyan válasszuk meg ezt a kontúrt, erre nézve világos topológiai szabály sajnos még nem áll rendelkezésünkre. Megfelelő eljárás az volna — pontos formába öntése még hátra van —, ha megkövetelnénk, hogy a kontúr az egyes éleknek ( $r=1, 2, 3, \dots$ ) megfelelő szingularitásokat vegye körül, mégpedig úgy, hogy egy egyszeres élet egy  $S^1 \times S^1$ , egy kétszeres élet egy  $S^1 \times S^3$ , egy háromszoros élet egy  $S^1 \times S^5$ , egy négyszeres élet pedig egy  $S^1 \times S^7$  tórusz vegyen körül. De ha még meg is tudnánk adni a pontos előírást, sok diagram esetében még mindig maradna némi (diszkrét) kétértelműség a kontúr megválasztásában. Egyes diagramokra vonatkozólag pedig ezeket az előírásokat valószínűleg egyáltalában nem lehet kielégíteni. A topológiai feladatok

nagyon bonyolulttá válhatnak és megoldásukban előreláthatólag jelentékeny szerephez jut a topológia algebrai gépezete. Sparling ezzel a módszerrel jutott több eredményére, amelyeket ugyanezen kötetben található cikkében részletez [38]. De úgy vélem, hogy ezen az úton még sok új felfedezésre számíthatunk.

Ha az élhez tartozó  $r$  nem egész szám, akkor a kontúrok — a fellépő sokrétegű Riemann-felületek miatt — bár zártak maradnak, mégis különböznek azoktól a kontúroktól, amelyek egész számú  $r$ -ekhez tartoznak. Sparlingnak ezekre az esetekre vonatkozólag is vannak eredményei, amelyeket doktori téziseiben írt le [49]. Ezeket a twistor-diagramokat itt nem tárgyaljuk részletesen.

Ha a diagramban vannak olyan élek, amelyekre  $r=0, -1, -2, \dots$ , (Sparling tanácsát[39] követve) az a szabály érvényes, hogy a kontúrnak *nem* kell zártnak lennie, de *határának abban a mértani helyben kell lennie, amelyet mindazon tartományok együttese alkot, amelyeket az adott élekkel asszociált twistor-skalárszorzatok eltűnése definiál*. Minthogy  $r=0, -1, -2, \dots$  esetén a (4.6) kifejezés nem szinguláris, ez (az előbbi) azt jelenti, hogy ismét olyan integrálandó kifejezésekkel van dolgunk, amelyek az integrálás teljes kompakt tartományán végesek. Minden esetben a (4.2)-ben levő  $W_\alpha Z^\alpha=0$  pólusokat a kontúrgörbének el kell kerülnie (ahogyan a (4.3)-beli elágazásos szingularitásokat is). Így a twistor-diagram által definiált integrálás eredményének mindig *végesnek* (vagy *zérusnak*) kell lennie. Hangsúlyozni kell, hogy minden integrálás — akár zárt, akár nyitott kontúrra vonatkozó — valódi kontúr-integrál. Más szóval: ha az integrálási tartományt folytonosan deformáljuk, miközben állandóan kielégítjük a fentebb részletezett feltételeket, akkor az integrálás eredménye változatlan marad. Ez a differenciális forma tulajdonságaiból és az integrandus holomorf természetéből következik.

Van némi különbség a twistor-diagramok mostani interpretációja és aközött, amit korábban megadtunk [19, 23]. A (4.1) differenciál-kifejezés használata itt megfelelőbb, mint a

$$\mathcal{D}ZY \dots WV \dots = \mathcal{D}Z \wedge \mathcal{D}Y \wedge \dots \wedge \mathcal{D}W \wedge \dots \quad (4.8)$$

kifejezésé, ahol

$$\begin{aligned} \mathcal{D}Z &= \frac{1}{6} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta} Z^\alpha dZ^\beta \wedge dZ^\gamma \wedge dZ^\delta \\ &= Z^0 dZ^1 \wedge dZ^2 \wedge dZ^3 - Z^1 dZ^0 \wedge dZ^2 \wedge dZ^3 \\ &\quad + Z^2 dZ^0 \wedge dZ^1 \wedge dZ^3 - Z^3 dZ^0 \wedge dZ^1 \wedge dZ^2 \end{aligned} \quad (4.9)$$

mivel a fenti kifejezés a projektív 3-térben végrehajtott integrálásokra alkalmas. Hogy belássuk a (4.1) és (4.8) kifejezések ekvivalenciáját, integráljunk az egyik twistor-változó szerint. Ekkor

$$\begin{aligned} \oint f(Z^x) d^4 Z &= \oint (Z^0)^4 f(Z^x) \frac{dZ^0}{Z^0} \wedge d\left(\frac{Z^1}{Z^0}\right) \wedge d\left(\frac{Z^2}{Z^0}\right) \wedge d\left(\frac{Z^3}{Z^0}\right) \\ &= \oint \left[ \sum_{r=-\infty}^{\infty} (Z^0)^{4+r} f_r\left(\frac{Z^x}{Z^0}\right) \right] \frac{dZ^0}{Z^0} \wedge d\left(\frac{Z^1}{Z^0}\right) \wedge d\left(\frac{Z^2}{Z^0}\right) \wedge d\left(\frac{Z^3}{Z^0}\right) \\ &= 2\pi i \oint f_{-4}(Z^x) (Z^0)^4 d\left(\frac{Z^1}{Z^0}\right) \wedge d\left(\frac{Z^2}{Z^0}\right) \wedge d\left(\frac{Z^3}{Z^0}\right) \\ &= 2\pi i \oint f_{-4}(Z^x) \mathcal{D}Z, \end{aligned} \quad (4.10)$$



ahol a  $Z_0$  kontúrt alkalmasan választottuk, a  $f = \sum f_r$ , pedig  $f$ -nek egy minden tagban  $r$  homogenitási fokú sorfejtése. Ha tehát egy függvény homogenitási foka már  $-4$ , akkor a  $2\pi i$  tényezőtől eltekintve nem lesz különbség akár a  $d^4Z$ , akár  $\mathcal{D}Z$  kifejezést használjuk. A twistor-diagramokra vonatkozó szabályok ezenkívül biztosítják, hogy az integrandusok homogenitási foka mindegyik változóra vonatkozólag valóban  $-4$  lesz. A  $d^4Z$  használata talán mégis több lehetőséget ígér, mert  $f$ -nek nem kell homogénnek lennie. Az integrálás kiemeli  $f$ -nek azt a „részét”, amelynek  $-4$  a homogenitási foka.

Előbbihez hasonlóan a (3.11)-et a

$$\begin{aligned} d^2W &= dW_0 \wedge dW_1 = \frac{1}{2} \varepsilon^{AB} dW_A \wedge dW_B = \frac{1}{2} I^{\alpha\beta} dW_\alpha \wedge dW_\beta \\ d^2Z &= dZ^0 \wedge dZ^1 = \frac{1}{2} \varepsilon^{A'B'} dZ_{A'} \wedge dZ_{B'} = \frac{1}{2} I_{\alpha\beta} dZ^\alpha \wedge dZ^\beta \end{aligned} \quad (4.11)$$

kifejezésekkel helyettesíthetjük. Ekkor (3.10)-et a

$$\Phi_{AB\dots L} = \frac{1}{(2\pi i)^2} \oint W_A W_B \dots W_L f(W_{P'} - ix^{PP'} W_P) d^2W \quad (4.12)$$

alakban írhatjuk fel, így a zérus nyugalmi tömegre vonatkozó (3.1) egyenletek — mint előbb — automatikusan ki vannak elégítve, most azonban nem kell feltennünk, hogy  $f(W_\alpha)$  homogenitási foka  $-n-2$ . Ha  $f$  homogenitási foka nem ez, akkor (4.12) kiemeli belőle azt a részt, amelyik igen.

Most nézzük meg, hogyan használhatók a twistor-diagramok a fizikában. Tegyük fel, hogy ki kell számítanunk egy szórásamplitúdót, amikor a beérkező és kimenő részecskék állapotait holomorf twistor-függvények írják le, mint ahogyan azt tömeg nélküli részecskékre vonatkozólag (3.10)-ben (lásd (4.12)-t), vagy tömeggel bíró részecskék esetében (3.39)-ben láthattuk. Itt csak a tömeg nélküli részecskék esetét fogjuk megvizsgálni. (A tömeggel bíró részecskékre vonatkozó tárgyalás a [37] irodalmi hivatkozásban található.) Ekkor a bejövő és kimenő állapotok egy-twistor-változós holomorf függvényekkel leírt megfelelő hullám-csomagok kell, hogy legyenek.

Vannak speciális típusú holomorf függvények, nevezetesen:

$$f(W_\alpha) = \frac{Q}{(W_\alpha A)^{p+1} (W_\beta B)^{q+1}} \quad \text{és} \quad g(Z^\alpha) = \frac{R}{(C_\alpha Z^\alpha)^{r+1} (D_\beta Z^\beta)^{s+1}}, \quad (4.13)$$

amelyek különösen jól beillenek a twistor-diagramok kereteibe. A hullám-csomagok nem szingulárisak, ha az  $A$  és  $B$  pontok illeszkedése  $\mathbf{PT}$ -ben és a  $C, D$  síkok metszése  $\mathbf{PT}$ -ben olyan vonalakat eredményez, amelyek  $\mathbf{N}$ -et nem szelik át, az ezeknek megfelelő  $\mathbf{M}$ -beli pont képzetes része tehát időszerű. Az ilyen hullám-csomagokat *elemi* állapotoknak nevezzük. Ha a vonal teljes egészében a  $\mathbf{PT}^-$ -ban fekszik, akkor a hullám-csomag frekvenciája pozitív; ha teljes egészében  $\mathbf{PT}^+$ -ban, akkor a hullám negatív frekvenciájú [32]. Az elemi állapotok minden egyes spinre vonatkozólag a teljesnél bővebb készletet alkotnak.

Látjuk majd, hogy a (4.13) kifejezések pontosan megegyeznek (egy esetleges konstans tényezőtől eltekintve) azzal a kifejezéssel, amely a twistor-diagram egy csúcspontjában találkozó külső élpárra írható fel (lásd a 6.7 ábrát). Ha a twistordiagram

összes külső éle páronként találkozik a diagram egy-egy csúcspontjában, akkor a diagram gyakran amplitúdókat (vagy parciális amplitúdókat) jelent, mégpedig olyan folyamatokra vonatkozólag, amelyekben minden külső állapot elemi állapot. Valójában bármilyen befutó vagy kimenő állapot reprezentálható egy diagram-részlettel — akár elemi állapotról van szó akár nem —, de utóbbi esetben előfordulhat, hogy a diagrammal való leírás nem explicit. Rögtön mutatunk erre néhány példát.

Hogy megtudhassuk, hogyan lehet kifejezéseket twistor-diagramokká átírni, bevezetesképpen megvizsgáljuk egy elektromágneses tér *töltésintegrálját*, bár szigorúan véve ez a kifejezés nem twistor-diagram. Tegyük fel, hogy  $\Phi_{AB}$  (3.7) mintájára elektromágneses teret ír le, amely egy bizonyos időszerű világ-csővön kívül forrásmentes. A  $\Phi_{AB}$  tér ebben a külső tartományban kielégíti (3.1)-et és feltesszük, hogy egy  $f(W_x)$  —4 homogenitási fokú holomorf twistor-függvény felhasználásával felírható (3.10) alakjában. A forrás  $e$  teljes töltése ekkor

$$e = \oint F_{ab}^* dx^a \wedge dx^b = -2i \oint \Phi_{AB} dx_A^A \wedge dx^{BA'} \quad (4.14)$$

ahol az integrálást a töltést körülvevő valamilyen zárt 2-felületre vonatkozólag kell elvégezni. (4.12)-t (4.14)-be helyettesítve

$$e = \frac{i}{2\pi^2} \oint f(W_x) W_A W_B d^2 W \wedge dx_A^A \wedge dx^{BA'}. \quad (4.15)$$

De

$$W_A W_B d^2 W \wedge dx_A^A \wedge dx^{BA'} = 2dW_0 \wedge dW_1 \wedge d(W_A x^{AD'}) \wedge d(W_B x^{B1'}) = -2d^4 W, \quad (4.16)$$

mert  $W_x$  átmegy  $x^a$ -n; vagyis  $W_x \leftrightarrow (W_{A'} - ix^{AA'} W_A)$ . (4.15)-be helyettesítve kapjuk, hogy

$$e = \frac{1}{\pi^2 i} \oint f(W_x) d^4 W = \frac{2}{\pi} \oint f(W_x) \mathcal{D}W. \quad (4.17)$$

És ugyanígy: ha  $g(W_x)$  homogenitási foka  $-6$  és (4.12), valamint (3.8)-hoz hasonlóan olyan linearizált gravitációs teret ír le, amely egy időszerű világcsövön kívül forrásmentes, akkor az,

$$\bar{A}_{\alpha\beta} = h \oint W_\alpha W_\beta g(W_\gamma) d^4 W \quad (4.18)$$

(ahol  $h$  állandó) — (3.51)-nek megfelelően — a forrás energia-impulzus és impulzusmomentumát definiálja.

Egy rendszer teljes töltése is kiszámítható az

$$e = \int j^a d^3 x_a \quad (4.19)$$

megfelelően választott  $\mathcal{S}$  hiperfelületre vonatkozó 3-dimenziós felületi integrállal; itt  $j^a$  a töltésáramvektor, amely kielégíti a

$$\nabla_a j^a = 0 \quad (4.20)$$

egyenletet és

$$d^3 x_a = \frac{1}{3!} \varepsilon_{abcd} dx^b \wedge dx^c \wedge dx^d \quad (4.21)$$



az  $\mathcal{S}$  3-dimenziós térfogat-eleme. (4.20) alapján (lásd (3.41)-et) joggal feltételezhetjük, hogy  $j_a$  egy — (3.39) szerint  $(-3, -3)$  homogenitási fokú —  $J(W_\alpha, Z^\alpha)$  kétváltozós twistor-függvényből származik és ezért (4.19)

$$e = \frac{1}{(2\pi i)^4} \oint J(W_\alpha, Z^\alpha) W_A Z_A, d^2 W \wedge d^2 Z \wedge d^3 x^{AA'} \quad (4.22)$$

alakú lesz, amelyben mind  $W_\alpha$ , mind  $Z^\alpha$  átmegy  $x^a$ -n. Ha most (4.22)-t az egymástól függetlenül változó  $W_\alpha$  és  $Z^\alpha$  twistorokra vonatkozó integrállal akarjuk felírni, akkor valójában  $W_\alpha Z^\alpha$  egy  $\delta$ -függvényét kell bevezetnünk, mert  $W_\alpha Z^\alpha$  zérus volta feltétele annak, hogy  $W_\alpha$  és  $Z^\alpha$  is átmenjen egy adott ponton.\*

Ha holomorf függvényeket kell kontúr mentén integrálni, akkor a Dirac-féle  $f(o) = \int f(x) \delta(x) dx$  integrál helyett jobban használható a Cauchy-féle  $f(o) = (2\pi i)^{-1} \oint f(z) \cdot z^{-1} dz$  formula. A

$$\frac{d(W_\alpha Z^\alpha)}{2\pi i W_\beta Z^\beta} \quad (4.23)$$

kifejezést bevezetve az integrálba, kapcsolatot teremtünk  $W_\alpha$  és  $Z^\alpha$  között. Így azt kapjuk, hogy

$$d^2 W \wedge d^2 Z \wedge W_A Z_A, d^3 x^{AA'} \wedge d(W_\alpha Z^\alpha) = 2d^4 W \wedge d^4 Z \quad (4.24)$$

de, hogy ez a kifejezés azonosság legyen és emellett

$$W_\alpha \leftrightarrow (W_{A'} - i x^{AA'} W_A), Z^\alpha \leftrightarrow (i y^{AA'} Z_{A'}, Z_{A'}) \quad (4.25)$$

az  $x^a$  és az  $y^a$  közötti kapcsolatra vonatkozólag további kikötés szükséges. Ez a következő lehet: minden általános  $W_\alpha$ -hoz és  $Z^\alpha$ -hoz úgy választjuk meg  $x^a$ -t és  $y^a$ -t, hogy  $W_\alpha$  mindig  $x^a$ -n,  $Z^\alpha$  mindig  $y^a$ -n menjen át és  $x^a = y^a$ , ha  $W_\alpha Z^\alpha = 0$ . Ezt sokféleképpen el lehet érni. Elégséges (4.24)-et abban az igen speciális esetben igazolni, mikor  $\mathcal{S}$ -et az  $x^0 = 0$  — vagyis az  $x^{00'} + x^{11'} = 0$  — egyenlet határozza meg. Ekkor az  $y^a$ -nak  $x^a$ -hoz való viszonyát a következőképpen választhatjuk meg:

$$y^{00'} = -x^{11'}, \quad y^{11'} = -x^{00'}, \quad y^{01'} = x^{01'}, \quad y^{10'} = x^{10'}.$$

A fentebb említett kikötéseket ((4.24)-et is ide értve) most nehézség nélkül közvetlenül igazolhatjuk.\*\* Ezután (4.23)-at betéve (4.22)-be és felhasználva (4.24)-et, megkapjuk

\* Ez  $W_\alpha$ -ra és  $Z^\alpha$ -ra vonatkozólag a holomorfiát érintő kikötés, de például az a feltétel, hogy az  $x^a$  pont valós legyen (vagy az — mondjuk —, hogy  $W_\alpha$  nulla legyen), a holomorfia szempontjából nem kikötés; ezért az integrálban az előbbi kell expliciten megadni, az utóbbi csak egy egyszerű megállapítás a kontúr helyére vonatkozólag.

\*\* Kissé általánosabb értelemben: kiválasztható egy  $S^{\alpha\beta}$  nemszinguláris, antiszimmetrikus twistor, amelynek inverze  $T_{\alpha\beta} \cdot y^a$  definíciója (mint (2.33)-ban) legyen  $Y^{\alpha\beta} = Z^{1\alpha} S^{\beta 1\gamma} x^a$  definíciója pedig  $X_{\alpha\beta} = W_{1\alpha} T_{\beta 1\gamma} Z^\gamma$ . Azok a pontok, amelyekre  $x^a = y^a$ , ekkor egy olyan komplex hiperfelületen vannak, amely (mivel (4.19) felülettől nem függ)  $\mathcal{S}$ -nek vehető. Ezt a felületet itt az  $X_{\alpha\beta} S^{\alpha\beta} = 0$  egyenlet határozza meg, ami PT-ben egy lineáris komplex néven ismert vonalrendszert definiál [24].  $y^a$  specifikálható mint  $x^a$ -nak egy  $X^{\alpha\beta} = S^{\alpha\gamma} X_{\gamma\delta} S^{\delta\beta}$ -val adott függvénye, és ezek után világos, hogy (4.24) igaz.

az eredményt:

$$e = \frac{2}{(2\pi i)^5} \oint \frac{J(W_\beta, Z^\beta)}{W_\alpha Z^\alpha} d^4 W \wedge d^4 Z. \quad (4.26)$$

Ezt a kifejezést később majd kapcsolatba hozzuk (4.17)-tel.

(4.26) egy speciális esete, nevezetesen két tömegnélküli  $1/2$  spinű tér skalárszorzata szolgáltatja első twistor-diagramunkat. Legyen ugyanis

$$j_{AA'} = \Phi_A \Psi_{A'}, \quad (4.27)$$

ahol  $\Phi_A$  és  $\psi_{A'}$  a Weyl-féle neutrino-egyenlet (a (3.1) és (3.3) egyenlet  $n=1=n'$  esetén) megoldásai és így megadhatók az  $f(W_\alpha)$  és  $g(Z^\alpha) - 3$  homogenitási fokú twistor-függvények segítségével a következőképpen:

$$\Phi(x^p)_A = \frac{1}{(2\pi i)^2} \oint W_\alpha f(W_\alpha) d^2 W, \quad \psi(x^p)_{A'} = \frac{1}{(2\pi i)^2} \oint Z_{A'} g(Z^\alpha) d^2 Z \quad (4.28)$$

$\bar{\Psi}_A$  és  $\Phi_A$  skalárszorzata pedig

$$\langle \bar{\Psi} | \Phi \rangle = K \oint \Phi_A \psi_{A'} d^3 x^{AA'} \quad (4.29)$$

lesz [27] (egy alkalmasan választott  $k$  konstans mellett), ami felülettől függetlenül, mivel  $\nabla^{AA'} (\Phi_A \psi_{A'}) = 0$  (lásd (4.26)-at) tekintettel arra, hogy a végtelenben fekvő  $I$  pont most  $\mathcal{S}$  3-felülethez tartozik. Ha (4.27)-et most behelyettesítjük (4.29)-be, és az eredményt egybevetve (4.19)-cel és (4.26)-tal, akkor azt kapjuk, hogy


$$\langle \bar{\Psi} | \Phi \rangle = \frac{2k}{(2\pi i)^5} \oint \frac{f(W_\beta) g(Z^\gamma)}{W_\alpha Z^\alpha} d^4 W \wedge d^4 Z. \quad (4.30)$$

A (4.30)-nak megfelelő diagram (az állandó tényező elhagyásával):



$$(4.31)$$

Abban a speciális esetben, mikor  $f$  és  $g$  a (4.13) szerinti elemi állapotokat generálnak és így  $p=0$ ,  $q=1$ ,  $s=1$  esetében az előbbi diagram a következőképpen módosul



$$(4.32)$$

A (4.31) diagramon látható bekarikázott  $f$  és  $g$ , egyszerűen magukat a függvényeket jelentik; a körökből kiinduló két vonal azt jelzi, hogy a szingularitás szerkezetének hasonlítani kell a megfelelő elemi állapotok szingularitásának szerkezetéhez; a (4.32) diagramon ez félreérthetetlen formában jelezve van. A (4.31) ábrán látható két „1” számjegy egyszerűen azt mutatja, hogy mind  $f$ , mind  $g$  homogenitási foka  $-3$ ; az „1” és minden vonal a homogenitást  $-1$ -gyel változtatja meg. (Általános függvények esetében nincs értelme annak, hogy mindegyik szingularitásnak külön-külön homogenitást tulajdonítsunk.) A (4.32) (és (4.31)) diagram közepén a dupla vonallal azt akarjuk jelezni, hogy a kontúr alapjához egy  $S^3$  járul, ami teljes összhangban van a 6.7 ábrán látható vázlattal. A (4.32) diagramhoz tartozó teljes kontúr szerkezete



tulajdonképpen tényleg  $S^1 \times S^1 \times S^1 \times S^1 \times (S^1 \times S^3)$ -nak vehető. (A (4.32) diagram topológiájának tárgyalására vonatkozólag lásd ugyanebben a kötetben *Sparling* cikkét.)

Zérus spinű, tömeg nélküli terek skalárszorzata

$$\langle \bar{\psi} | \Phi \rangle = -ik \oint \frac{1}{2} (\Phi \nabla_a \psi - \psi \nabla_a \Phi) d^3 x^a \quad (4.33)$$

és ugyanez  $\frac{1}{2} n$ -nél nagyobb spinű terekre

$$\langle \bar{\psi} | \Phi \rangle = i^{n-1} k \oint \underbrace{\Phi_{AB\dots L}}_n \overbrace{\psi^{B\dots L}}^{(1) \overbrace{\phantom{\psi^{B\dots L}}}^{n-1}} d^3 x^{AA'}, \quad (4.34)$$

alakban írható fel, ahol  $\psi_{A'B'\dots L}^{(1)}$  nem más, mint a  $\psi_{A'B'\dots L'}$  térre vonatkozó potenciál, amelynek a térhez való kapcsolatát a

$$\nabla^{FF'} \psi_{A'\dots E'F'}^{(r)G\dots L} = 0, \quad \nabla_{GG'} \psi_{A'\dots F'}^{(r)GH\dots L} = \psi_{A'\dots F'G'}^{(r+1)H\dots L}; \quad \psi_{A'\dots L'}^{(n)} = \psi_{A'\dots L'} \quad (4.35)$$

„lánc” [27] fejezi ki. Kimutatható, hogy (4.33) és (4.34) a 3-felülettől független, hermitikusan szimmetrikus és mérték-invariáns kifejezések. Konform invarianciájuk, mint látni fogjuk, a nekik megfelelő (4.49) twistor-kifejezésből következik (lásd a 40 irodalmi hivatkozást is).

A (4.33), (4.29) és (4.34) kifejezések kapcsolatba hozhatók egymással azon felismerés alapján, hogy ha  $Q^A$  kielégíti a (2.13)

$$\nabla_{B'}{}^{(B} Q^{A)} = 0 \quad (4.36)$$

twistor-egyenletet, akkor

$$\gamma_{A\dots K} = \Phi_{A\dots KL} Q^L \quad (4.37)$$

kielégíti a  $\frac{1}{2} (n-1)$  spinű, zérus nyugalmi tömegre vonatkozó egyenletet, valahányszor  $\Phi_{A\dots L}$  kielégíti az  $\frac{1}{2} n$  spinű (3.1) egyenletet, továbbá:

$$\psi_{A'\dots K'L'} = -iQ^L \nabla_{LL'} \chi_{A'\dots K'} - n \chi_{(A'\dots K'} Q_{L')} \quad (4.38)$$

kielégíti az  $\frac{1}{2} n$  spinű (3.3) egyenletet, ha  $\chi_{A'\dots K'}$  kielégíti az  $\frac{1}{2} (n-1)$  spinű egyenletet, ahol a  $Q_A$ , konstans spinornak  $Q^A$ -hoz való viszonyát (2.14) foglalja magában:

$$\nabla_{AA'} Q^B = -i\epsilon_{AA'}^B Q_{A'}. \quad (4.39)$$

Így a  $Q$  twistort a

$$Q^z \leftrightarrow (Q^A, Q_{A'}) \quad (4.40)$$

reláció szolgáltatja. Ha a  $-n-2$  homogenitási fokú  $f(W_\alpha)$  generálja  $\Phi_{A\dots L}$ -et és a  $-n-1$  homogenitási fokú  $h(Z^\alpha)$  pedig  $\chi_{A'\dots K'}$ -t, akkor közvetlenül igazolható,

$$(Q^\alpha W_\alpha) f \text{ és } Q^\alpha \partial h / \partial Z^\alpha \quad (4.41)$$

hogy generálja  $\gamma_{A\dots K}$ -t, illetve  $\psi_{A\dots M'}$ -et. Jegyezzük meg, hogy a  $Q^\alpha W_\alpha$  és  $Q^\alpha \partial / \partial Z^\alpha$  helicitást növelő operátorok;  $\bar{Q}_\alpha Z^\alpha$  és  $\bar{Q}_\alpha \partial / \partial W_\alpha$  helicitást csökkentő operátorok.

(4.37) és (4.38)-ból most levezetjük, hogy

$$\langle \bar{\psi} | \Phi \rangle = \langle \bar{\chi} | \gamma \rangle. \quad (4.42)$$

Először (4.34)-re bizonyítjuk ezt. Figyeljük meg, hogy a (4.35)-öt kielégítő,  $\chi_{A' \dots K'}$ -höz tartozó potenciál-készlet a  $\psi_{A' \dots K'}$ -höz tartozó potenciálokkal a következőképpen hozható kapcsolatba (lásd (4.38)-at):

$$\psi_{A' \dots E' F'}^{(r) G \dots L} = -i Q^M \nabla_{M F'} \chi_{A' \dots E'}^{(r-1) G \dots L} - r \chi_{(A' \dots E'}^{(r-1) G \dots L} Q_{F')}$$

Ezt (4.34)-be helyettesítve azt kapjuk, hogy

$$\langle \bar{\psi} | \Phi \rangle = i^{n-1} k \oint \{ -i \Phi_{AB \dots L} Q^M \nabla_{M A'} \chi_{B \dots L}^{(0)} - \Phi_{AB \dots L} \chi_{A'}^{(0) B \dots L} Q_A \} d^3 x^{AA'},$$

ami a következővel egyenlő:

$$\langle \bar{\chi} | \gamma \rangle = i^{n-2} k \oint_{AB \dots KL} Q^L \chi_{A'}^{(1) B \dots K} d^3 x^{AA'}$$

mivel

$$Q^L \chi_{A'}^{(1) B \dots K} = Q^L \nabla_{M A'} \chi_{B \dots K}^{(0)} = Q^M \nabla_{M A'} \chi_{B \dots KL}^{(0)} - Q^M \nabla_{A'}^L \chi_{M B \dots K}^{(0)}$$

és

$$\oint \nabla_{A'}^L (\Phi_{AB \dots KL} Q^M \chi_{M B \dots K}^{(0)}) d^3 x^{AA'} = 0;$$

utóbbi összefüggés abból következik, hogy

$$\nabla_{A'}^L \alpha_{AL} d^3 x^{AA'} = d \left\{ \frac{i}{2} \alpha_{AB} dx_{A'}^A \wedge dx^{BA'} \right\} \quad (4.43)$$

ha  $\alpha_{AL} = \alpha_{LA}$ . A bizonyítás menete (4.33)-ra vonatkozólag teljesen hasonló az előbbihez.

Írjuk fel a skalárszorzatot magukkal a twistor-függvényekkel a bracket-jelölést alkalmazva (ekkor (4.30) alakja  $\langle \bar{\psi} | \Phi \rangle = \langle \bar{g} | f \rangle$  lesz). Ezzel a jelöléssel (4.42)-ből  $\langle \bar{Q}^a \partial h / \partial \bar{Z}^a | f \rangle = \langle \bar{h} | Q^a W_a f \rangle$  lesz (lásd (4.41)-et) vagy — a skalárszorzat lineáris volta miatt —

$$\langle \bar{\partial} h / \partial \bar{Z}^a | f \rangle = \langle \bar{h} | W_a f \rangle \quad (4.44)$$

vagy pedig

$$\left\langle \bar{h} \left| \frac{\bar{\partial}}{\partial \bar{Z}^a} \right| f \right\rangle = \langle \bar{h} | W_a | f \rangle. \quad (4.45)$$

Vegyük a konjugált komplexeket és adjunk új indexeket  $\bar{W}^a$ -nak és  $Z^a$ -nak; a (4.45) reláció ekkor a  $\partial / \partial \bar{Z}^a = Z^a$  operátor-egyenletet fejezi ki, vagy — mivel [41] a (4.45) bal oldalán látható derivált a —  $\partial / \partial \bar{Z}^a$  operátornak vehető — (4.45) közvetlenül a  $-\partial / \partial Z^a = \bar{Z}_a$  operátoregyenletet (lásd (3.35)-öt) jelenti.

A (4.44) egyenlet módot nyújt arra, hogy levezessük a skalárszorzat twistor-ki-fejezéseit az  $\frac{1}{2}$  spinű tömeg nélküli részecskék esetéből tetszőleges spinű részecskék esetére. (Szabad hullámok tárgyalásakor az általánosság nem szenved csorbát, (4.37)-ben  $\Phi_{A \dots L}$ -ről  $\gamma_{A \dots K}$ -ra, (4.38)-ban  $\chi_{A' \dots K'}$ -ről  $\psi_{A' \dots L'}$ -re térünk át [28]). Vegyük

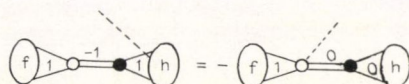


először azt az esetet, mikor a spin zérus.  $h(Z^\alpha)$  és  $f(W_\alpha)$  homogenitási foka legyen rendre  $-2$ , illetve  $-3$ . Ekkor a (4.44) jobb oldalán álló skalárszorzat a zérus spinre, a bal oldalán álló pedig az  $\frac{1}{2}$  spinre vonatkozó kifejezés. (4.44) és (4.30) alapján

$$\begin{aligned}\langle \bar{h} | W_\alpha f \rangle &= ik' \oint \frac{f(W_\sigma) \partial h(Z^e)}{W_\beta Z^\beta \partial Z^\alpha} d^4 W \wedge d^4 Z \\ &= -ik' \oint \frac{W_\alpha f(W_\sigma) h(Z^e)}{-(W_\beta Z^\beta)^2} d^4 W \wedge d^4 Z\end{aligned}\quad (4.46)$$

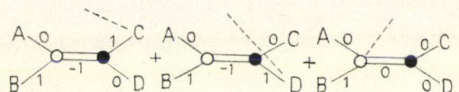
ha  $Z^\alpha$  szerint parciálisan integrálunk. Ebből látható, hogy a skalárszorzat twistor-kifejezése zérus spin esetében csak abban tér el az  $\frac{1}{2}$  spinre vonatkozó kifejezéstől, hogy a (4.30) nevezőjében szereplő  $W_\beta Z^\beta$  tényező helyett ennek négyzete szerepel.

A (4.46) parciális integrálást a következő diagrammal ábrázolhatjuk:



$$(4.47)$$

Itt a  $h$  körhöz csatlakozó pontozott vonal a  $h$ -n végzendő  $\delta/\delta Z^\alpha$  műveletet jelenti, az üres karikával jelzett csúcshoz húzott pontozott vonal ezzel szemben a számlálóban levő  $W_\alpha$  tényezőnek felel meg. Elemi állapotok segítségével — ha  $f$  és  $g$  (4.13) szerint adott és  $p=0$ ,  $q=1$ ,  $r=0$  és  $s=0$  — (4.44)-et a következő alakban is felírhatjuk



$$(4.48)$$

(a  $C$ -hez húzott pontozott vonal egy  $C_\alpha$ , stb. tényező jelenlétére utal), ami az

$$\oint \frac{1}{A^\beta W_\beta (B^\gamma W_\gamma)^2} \frac{\partial}{\partial Z^\alpha} \left\{ \frac{1}{W_e Z^e C_\sigma Z^\sigma D_\gamma Z^\gamma} \right\} dW Z = 0$$

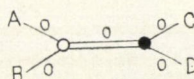
sorfejtést jelzi. A (4.48) egyenlet a parciális integrálást rajzos jelölésének tipikus esete. Később még látni fogunk ilyeneket.

Ha  $(Q^\alpha W_\alpha)f$ -et most  $b$ -vel jelöljük, akkor (4.47)-ből látható, hogy a  $\langle \bar{h} | b \rangle$  skalárszorzat diagramja (egy állandó tényező elhagyásával) a következő



$$(4.49)$$

és ugyanez elemi állapotokkal felrajzolva ( $p=q=r=s=0$ ):



$$(4.50)$$

A parciális integrálás menete hasonló az előbbihez, ha magasabb spinű skálárszorzatok twistor-kifejezéseit akarjuk megkapni. Lényeges különbség az előző esethez képest, hogy most a  $(W_\alpha Z^\alpha)^{-1}$  tagot  $Z^\alpha$  szerint *integrálni* kell. A módszerek, amelyeket ennek végrehajtására kidolgoztak, vagy logaritmikus tagokat használnak (a logaritmus függvény nem-homogén természete azonban nehézséget jelenthet), vagy pedig nem-egész kitevőket alkalmaznak és veszik a megfelelő határértéket. Több rétegű Riemann-felületek fellépése mindkét esetben nehézséget okozhat. Az itt közölt módszer — Sparling javaslatát követve — úgy próbálja elkerülni ezeket a nehézségeket, hogy olyan kontúrt alkalmaz, amelynek határa van. Abból indulunk ki, hogy az

$$\oint (W_\beta Z^\beta)_1 W_\alpha f d^4 Z = \oint \frac{W_\alpha f}{2\pi i W_\beta Z^\beta} d^4 Z = - \oint (W_\beta Z^\beta)_0 \frac{\partial f}{\partial Z^\alpha} d^4 Z \quad (4.51)$$

parciális integrálást úgy interpretáljuk, hogy a benne szereplő  $(W_\beta Z^\beta)_0$  szimbólum nem olyan szingularitást jelöl, amely körül integrálni kell, hanem a  $\oint$  szimbólum jelentését formálisan  $(\oint)$  nyílt kontúr-integrálba viszi át úgy, hogy a kontúr határa a  $W_\beta Z^\beta = 0$ -ban van és a  $(W_\beta Z^\beta)_0$  tényező számértéke az egység. (Megjegyzendő, hogy ez (4.3)-mal és (4.6)-tal összhangban van.) Ha feltesszük, hogy megfelelő kontúrok léteznek, akkor (4.51) igazolására figyelembe vesszük, hogy

$$\begin{aligned} \oint (W_\beta Z^\beta)_0 \frac{\partial f}{\partial Z^\alpha} d^4 Z &= \oint \frac{\partial f}{\partial Z^\alpha} d^4 Z \\ &= \oint d(f d^3 Z_\alpha) = \oint f d^3 Z_\alpha, \\ W_\beta Z^\beta &= 0 \end{aligned} \quad (4.52)$$

előbbieken felhasználtuk a divergencia tételt és

$$d^3 Z_\alpha = \frac{1}{6} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta} dZ^\beta \wedge dZ^\gamma \wedge dZ^\delta. \quad (4.53)$$

A (4.52)-ben szereplő utolsó integrál, amely a  $Z$ -térben levő  $W_\beta Z^\beta = 0$  komplex hiperfelületre terjed ki — a (4.23)-ban alkalmazott fogás felhasználásával — egy 4-dimenziós integrálra vezethető vissza; e fogás abban áll, hogy egy tulajdonképpeni  $\delta$ -függvényt — ami az egyik  $Z$ -változó függvénye — a Cauchy-tétel segítségével írunk fel. Ekkor

$$d^3 Z_\alpha \wedge d(W_\alpha Z^\beta) = -W_\alpha d^4 Z \quad (\text{ha } W = \text{konst.}) \quad (4.54)$$

így (4.52) a következőképp írható fel

$$\begin{aligned} \oint f d^3 Z_\alpha &= \oint f d^3 Z_\alpha \wedge \left\{ \frac{d(W_\beta Z^\beta)}{2\pi i W_\gamma Z^\gamma} \right\} \\ W_\beta Z^\beta &= 0 \\ &= - \oint \frac{W_\alpha f}{2\pi i W_\gamma Z^\gamma} d^4 Z \end{aligned} \quad (4.55)$$

amit (4.52)-vel kombinálva — amint vártuk — (4.51)-et kapjuk.





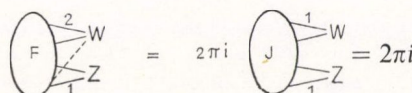




Mivel  $\Phi_{AB}$  nem elégíti ki a (3.1)-et, szükségünk van egy  $-4$ ,  $-2$  homogenitási fokú  $2$  változós  $F(W_\alpha, Z^\alpha)$  twistor-függvényre, ami generálja a teret. (4.67) és (3.43) egybevetésével — (3.45) segítségével — a  $j$ -t generáló  $J(W_\alpha, Z^\alpha)$  twistor-függvény megkapható:

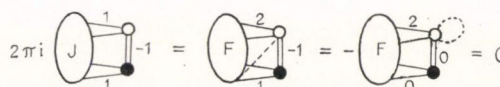
$$I^{\alpha\beta} W_\alpha \frac{\partial F}{\partial Z^\beta} = 2\pi i J. \quad (4.68)$$

Ugyanez rajzos alakjában



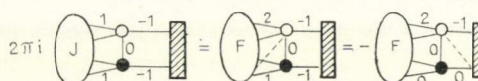
$$= 2\pi i \quad (4.69)$$

(a bal oldalon látható pontozott vonal valójában két „fehér” csúcsot köt össze, ami egy végtelen twistor fellépését jelzi (lásd a 6.7 ábrát). Ha a (4.26) töltés-integrált kompakt kontúr mentén kellene elvégezni, diagramja arányos volna a következő diagramokkal



$$= 0 \quad (4.70)$$

mert ha húrokhoz pontozott vonalat adunk ( $I^{\alpha\beta}$  antiszimmetrikus lévén), fellép az  $I^{\alpha\beta} W_\alpha W_\beta = 0$  tényező. Ez a magyarázata annak, hogy zárt univerzum (jelen esetben egy *kompakttá tett* Minkowski-tér) teljes töltése zérus kell, hogy legyen. Ha a töltés nem zérus, a kontúrnak nyílnak kell lennie,) ez összhangban van azzal ténnyel, hogy a térszerű  $S$  hiperfelületből — amelyre az integrálás kiterjed — az  $I$  pont környezetét kizártuk). Diagrammal ezt így írhatjuk fel



$$= 0 \quad (4.71)$$

Itt a vonalkázott téglalapok azt a  $(W_\alpha, Z^\beta)$ -térben helyet foglaló  $L$  (holomorf) geometriai helyet jelölik, ahol a kontúr korlátjának (határának) lennie kell. Egy  $L_\beta^\alpha$  twistorhoz tartozó  $L$  megválasztása megfelelő, ha definíciója  $W_\alpha L_\beta^\alpha Z^\beta = 0$ . Ez azt az esetet is magában foglalja, amikor  $\partial\mathcal{S}$  térszerű 2-gömb. Ha  $L$ -et így választjuk és fel tesszük, hogy a (4.71) jobb oldalán álló integrált úgy végezzük el, hogy előbb minden egyes  $W_\alpha$  konstansra végrehajtjuk a  $Z$ -integrált, majd utána a  $W$ -integrált, akkor a  $Z$ -integrált a következőképpen fejezhetjük ki:

$$\oint \left\{ \frac{W_\alpha U_\beta I^{\alpha\beta}}{W_\sigma Z^\sigma U_\sigma Z^\sigma} \right\} F(W_\gamma, Z^\gamma) d^4 Z. \quad (4.72)$$

Itt  $U_\sigma$ -t  $Z_\sigma = L_\sigma^\alpha W_\alpha$  szolgáltatja.

(4.72) más szempontból is fontos. Tegyük fel, hogy  $F$  homogenitási foka  $W_\gamma$ -ban nem  $-4$  (lényeges azonban, hogy  $Z^\gamma$ -ban a homogenitási fok továbbra is  $-2$  legyen), tehát olyan esetekre is érvényes, mikor a spin nem  $1$ ;  $U_\alpha$ -t és  $W_\alpha$ -t pedig vegyük tetszőlegesnek. Az  $\mathbf{M}$ -ben levő  $y^\alpha$  pont legyen  $W_\alpha$  és  $U_\alpha$  metszéspontja (vagyis a  $W_{[\alpha} U_{\beta]}$  twistor definiálja). Ekkor könnyű megmutatni, hogy a

$$\oint F(W_\gamma, Z^\gamma) d^2 Z$$

integrál a  $Z^\alpha \leftrightarrow (iy^{AA'} Z_{A'}, Z_{A'})$  segítségével, rögzített  $y^a$  (és  $W_\gamma, U_\gamma$ ) mellett (4.72)-vel azonos módon fejezhető ki.

Az  $F$  által generált,  $(-n-2, -2)$  homogenitási fokú téridőmezőnek csak  $n$  vesszőtlen indexe van és az  $\frac{1}{2}n$  spinű (3.1) *szabadtér-egyenleteket* akkor elégíti ki, ha

$$I^{\alpha\beta} W_\alpha \partial F / \partial Z^\beta = 0 \quad (4.73)$$

(lásd (3.45)-öt). Ez a feltétel azt is kifejezi, hogy (4.72) független  $U_\sigma$ -tól (itt azt is feltettük, hogy  $U_\sigma$  és  $W_\sigma$  egymástól függetlenek), ezért (4.72)-t olyan módszernek tekinthetjük, amely lehetővé teszi az áttérést a zérus nyugalmi tömegű szabad térre vonatkozó 2 változós  $F$  twistor-függvényről az ugyanezen teret generáló  $f(W_\alpha)$  egyváltozós twistor-függvényre. Diagrammally felírva

$$\begin{array}{c} \text{---}^n W \\ \diagup \\ \text{---} F \\ \diagdown \\ \text{---}_1 Z \end{array} = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{array}{c} \text{---}^n W \\ \diagup \\ \text{---} F \\ \diagdown \\ \text{---}_0 U \end{array} = \begin{array}{c} \text{---}^n W \\ \diagup \\ \text{---} f \\ \diagdown \\ \text{---}_0 U \end{array} \quad (4.74)$$

Még ha a szabadtér-egyenletek nem is állnak fenn, e módszer segítségével egy  $f(W_\alpha)$ -hoz jutunk, feltéve, hogy  $U_\alpha$  (egy arányossági tényezőtől eltekintve) adott,  $W_\alpha$  függvényeként. Ez volt a helyzet abban a levezetésben, amely (4.72)-t szolgáltatta, az  $f$  által generált teret pedig egy a  $\partial\mathcal{S}$ -nél definiált szabad tér leírásának tekinthetjük, amely  $\partial\mathcal{S}$ -nél  $\Phi_{AB}$ -vel egyezik meg. Ha feltesszük, hogy a kontúr elhelyezkedését illető (alapjában véve topológiai) kérdések (ideértve azt is, hogy a  $W_\alpha$ -integráláshoz tartozó utolsó korlátos kontúr zárttá tehető) megoldhatók, akkor a (4.71) és (4.74) képletek — formálisan mindenestre — megadják a kívánt kapcsolatot a (4.17) és (4.26) twistorkifejezések között.

Hasonló módon végezhető el a 2 spin-értéknek, vagyis a lineáris gravitációnak megfelelő levezetés, de ebben az esetben  $T_{ab}$ -nak *spur-mentesnek* kell lennie (vagyis zérus nyugalmi tömegű terekből kell származnia), ami azért szükséges, hogy  $T_{AA'BB'}$   $A, B$  és  $A', B'$ -ben szimmetrikus legyen és így — mivel  $\nabla^a T_{ab} = 0$  — kétváltozós  $T$ -twistorfüggvény generálja. A spurmentes

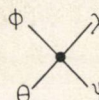
$$\begin{array}{c} \text{---}^2 \\ \diagup \\ \text{---} T \\ \diagdown \\ \text{---}_2 \end{array} \begin{array}{c} \text{---}^{-1} \\ \diagup \\ \text{---} \\ \diagdown \\ \text{---}^{-1} \end{array} \quad \text{vagyis} \quad E_\beta^\alpha = g \oint \frac{W_\beta Z^\alpha}{W_\gamma Z^\gamma} T(W_\sigma, Z^\sigma) dW Z \quad (4.75)$$

mennyiség (ahol  $g$  valamilyen állandó) definiálja a konform generátorokból származó 15 megmaradó mennyiséget (lásd (3.59) és (3.60)-at, az energia-impulzus és impulzusnyomaték 10 komponensét (3.57) leválasztja. Az elektromágneses esetre vonatkozó fentebb közölt analóg számolás valóban megadja a — (4.18) és (4.75) integrálok között fennálló — keresett kapcsolatot.

Végül vizsgáljunk meg röviden néhány kölcsönhatást. Mivel nem áll rendelkezésünkre olyan általános és következetes módszer, amely magából a twistorelméletből eredne, néha úgy járunk el, hogy egyszerűen twistorokkal írjuk fel a — valamilyen perturbációs sorbafejtésnek megfelelő — Feynmann-diagramokkal adott lokális teret.



Elsőként vegyünk egy tömeg nélküli  $\Phi^4$  skalár kölcsönhatásra vonatkozó Feynmann-vertexet:



$$(4.76)$$

Ki kell számítanunk az  $\mathbf{M}$  (kompakt) térre kiterjesztett vagy pedig egy, a  $\mathbf{CM}$ -ben fekvő alkalmas 4 dimenzi zárt kontúr mentén vett

$$\oint \Phi(x^a) \theta(x^a) \psi(x^a) \chi(x^a) d^4 x \quad (4.77)$$

téridő-integrált; utóbbi esetben

$$d^4 x = dx^0 \wedge dx^1 \wedge dx^2 \wedge dx^3 = \frac{1}{24} e_{abcf} dx^a \wedge dx^b \wedge dx^c \wedge dx^f. \quad (4.78)$$

Az átírás akkor a legegyszerűbb, ha a  $\Phi, \theta, \psi, \chi$ -t az  $f(W_\alpha)$ ,  $t(X^z)$ ,  $p(Y_\alpha)$  és  $h(Z^\alpha)$  twistorfüggvények generálják, amelyek közül kettő az  $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$  twistortérben, kettő pedig a  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$  térben van definiálva és a függvények homogenitási foka kivétel nélkül  $-2$  (lásd (3.14)-et). Ekkor (4.77) twistorokkal felírva

$$\oint f(W_\alpha) t(X^z) p(Y_\alpha) h(Z^\alpha) d^2 W \wedge d^2 X \wedge d^2 Y \wedge d^2 Z \wedge d^4 x, \quad (4.79)$$

itt  $W_\alpha, \dots, Z^\alpha$  ugyanazon az  $x^a$  ponton mennek át. Valódi twistorintegrál esetében  $W_\alpha, \dots, Z^\alpha$  mindegyike olyan, hogy a többitől függetlenül változhat. Az a kényszer, hogy mindegyik ugyanazon a ponton menjen át, a következőképpen fejezhető ki:

$$W_\alpha X^z = Y_\alpha X^z = Y_\alpha Z^\alpha = W_\alpha Z^\alpha = 0. \quad (4.80)$$

(Ha valós fényszerű vonalak metszésében gondolkodunk, ez a feltétel helytelennek tűnik, de ez csak azért, van, mert figyelmen kívül hagytuk azt a tényt, hogy  $x^a$  komplex is lehet.) Egyszerűbbé válik a helyzet, ha  $\mathbf{PT}$ -ben fekvő pontokban és síkokban gondolkodunk; (4.8 kimondja, hogy a  $\mathbf{PT}$ -ben fekvő  $\mathbf{X}$  és  $\mathbf{Z}$  pontokat összekötő vonal egybeesik a  $\mathbf{PT}$ -ben fekvő  $\mathbf{W}$  és  $\mathbf{Y}$  síkok metszéspontjával, ha  $\mathbf{X} \neq \mathbf{Z}$  és  $\mathbf{W} \neq \mathbf{Y}$ .) Ez azt jelenti, hogy a (4.79) integrálba — ugyanúgy, mint (4.23)-ban és (4.55)-ben — be kell építenünk a (4.80) skalárszorzatok reciprokait, valamint mindegyik skalárszorzat differenciáját. E cél érdekében szükségünk van a

$$\begin{aligned} d^2 W \wedge d^2 X \wedge d^2 Y \wedge d^2 Z \wedge d^4 x \wedge d(W_\alpha X^\alpha) \wedge d(Y_\beta X^\beta) \wedge d(Y_\epsilon Z^\epsilon) \wedge d(W_\sigma Z^\sigma) = \\ = id^4 W \wedge d^4 X \wedge d^4 Y \wedge d^4 Z \end{aligned} \quad (4.81)$$

azonosságra, amelyben  $x^a$ -t mint  $W_\alpha$  és  $Y_\alpha$ ,  $y^a$ -t mint  $X^\alpha$  és  $Z^\alpha$  metszését definiáljuk, vagyis

$$\begin{aligned} W_\alpha &\leftrightarrow (W_{A'} - ix^{AA'} W_A), \quad Y_\alpha \leftrightarrow (Y_{A'} - ix^{AA'} Y_A) \\ X^\alpha &\leftrightarrow (iy^{AA'} X_{A'}, X_{A'}), \quad Z^\alpha \leftrightarrow (iy^{AA'} Z_{A'}, Z_{A'}). \end{aligned} \quad (4.82)$$



Végső következtetésünk: (4.77) arányos az alábbi diagram-kifejezéssel:

(4.83)

vagy ugyanez elemi állapotokkal felírva

(4.84)

utóbbit a (4.76)  $\Phi^4$  Feynmann-vertex twistor-változatának\* tekinthetjük.

Kiderül, hogy (4.84)-hez nemcsak egy darab érdekes kontúr tartozik (lásd Sparling cikkét). Van olyan kontúr, amely mind a négy elemi állapotra szimmetrikus megoldást ad és (eltekintve a kitevő előjelét érintő sajtóhibától\*\* és egy állandó tényező elhagyásától) megegyezik a 19 irodalmi hivatkozásban találhatóval. Kifogásolhatja valaki, hogy ez nem a „fizikai” megoldás, mert az elemi állapotok közötti egyes speciális relatív elhelyezkedések esetében végtelenné válik (mert a kontúr „beszorul”). Ehelyett vehetünk egy olyan kontúrt, amely — az elemi állapotok egy adott készletére vonatkozólag — annak az esetnek felel meg, mikor a (4.77) integrál az  $M$  valós pontjaira terjed ki. Ez véges megoldást ad (de nem szimmetrikus mind a 4 elemi állapotra). Világosan látható ebből, hogy ha egy twistor-diagramhoz megtaláltuk az integrandust, a feladatnak még csak egy részét oldottuk meg. Szükség van még egy olyan módszerre is, amellyel a kontúr topológiai elhelyezkedését (homológiai osztályát) lehet definiálni.

A (4.77)-es integrál twistor-kifejezésekkel való felírására más, bonyolultabb eljárások is vannak. Például: ha minden állapotot a  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ -twistor-térben definiált twistorfüggvénnyel van leírva, akkor a következő két alak vezethető le:

(4.85)

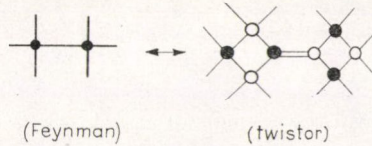
(itt feltesszük, hogy mindegyik vonal címkéje „0”). Jegyezzük meg, hogy a twistor-diagramokon megjelenő zárt hurkok nem okozzák végtelenek megjelenését; ez a fenti esetekben egészen természetes, hiszen a rajzon csak egy Feynmann-vertex (csúcs)

\* Figyeljük meg, hogy itt egy (zárt hurokra vonatkozó) 16 dimenziós integrálást végzünk el egy olyan folyamat kiszámítására, amely a szokásos Feynmann-féle impulzustér reprezentációban egyáltalában nem igényel integrálást! A twistorelméletben igen fontos, hogy ilyen dolgok ne csüggeszszék el az embert!

\*\* Fel kell hívnom a figyelmet arra, hogy a [19] irodalmi hivatkozás (4.26) egyenletében is sajtóhiba van. A jobb oldal helyesen:  $\alpha^a \beta^c \lambda^b \mu^d \delta$ .



szerepel. Úgy látszik azonban, hogy ez magasabb rendű diagramokra is igaz, így a (divergens) Feynmann-diagramok és a twistor-diagramok közötti kapcsolat nem teljesen világos. Mégis jogosnak *tűnik*, hogy twistor-diagramokat például az alábbi, könnyen érthető módon összekapcsoljuk

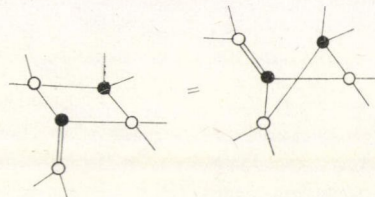


(Feynman)                      (twistor)

(4.86)

és — amennyiben ennek egyáltalában valamilyen jelentést lehet tulajdonítani — a twistor-diagram közepén látható kettős vonal egy virtuális „tömeghéjon kívüli” részecskét ábrázol.

Sok azonosság ismert a twistor-diagramok közötti kapcsolat felírására; ilyen például a következő (mindegyik vonalhoz ismét zérus tartozik)


(4.87)

nem mindegy azonban, hogy a kontúrt hogyan választottuk meg. Ez ismét arra figyelmeztet, hogy a kontúr topológiája az elmélet nélkülözhetetlen része.

E fejezetet a Möller-féle szórás vizsgálatával zárom (tömeg nélküli elektronok esetében). A diagramot lépésről lépésre építjük fel\*. Legyen  $\Phi_A$  és  $\theta_A$  két  $1/2$  spinű, tömeg nélküli tér, amelyeket az  $f(W_a)$  és  $t(X^a)$  — 3 homogenitási fokú twistorfüggvények generálnak,  $\alpha_a$  pedig legyen egy elektromágneses potenciál, amelyet a  $-3$ ,  $-3$  homogenitási fokú  $A(Y_a, Z^a)$  twistorfüggvény generál. Először is twistor-alakban írjuk fel a (4.89) Feynmann-grafnak megfelelő (**M**-re kiterjesztett)

$$\oint \Phi(x^a)_B \theta(x^a)_C, \alpha(x^a)^{BC'} d^4x \quad (4.88)$$

integrált:


(4.89)

A twistorfüggvényt (4.88)-ba helyettesítve a következő integrált kapjuk:

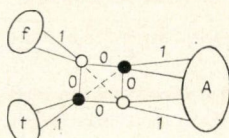
$$\oint W_B f(W_B) X_C t(X^a) Y^B Z^C A(Y_a Z^a) d^2W \wedge d^2X \wedge d^2Y \wedge d^2Z \wedge d^4x.$$

Mivel

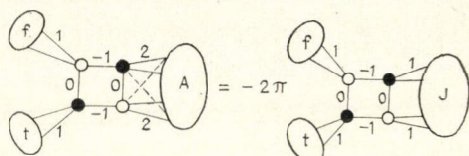
$$W_B Y^B = W_\alpha Y_\beta I^{\alpha\beta} \quad \text{és} \quad X_C Z^{C'} = X^z Z^\beta I_{\alpha\beta},$$

\* A gondolatmenet egy része *J. R. Moore*-tól származik.

(lásd (2.44)-et), ugyanazt a gondolatmenetet követhetjük, mint amelyen (4.79)-ből kiindulva végighaladtunk; így végül megkapjuk a (4.89)-et ábrázoló twistor-diagramot;


(4.90)

Kétszer parciálisan integrálva (és emlékezve arra, hogy két pontozott vonal találkozás nem szolgáltat tagot, mivel végtelen twistorok vannak jelen és (2.45) miatt is) a következő eredményt nyerjük:


(4.91)

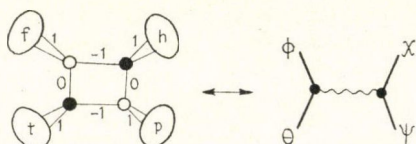
amelyben a potenciál és egy áramforrás közötti kapcsolatot  $\square \alpha_a = 4\pi j_a$  adja, amit

$$-2I_{\alpha\beta}Z^\alpha \frac{\partial}{\partial Y_\beta} \left\{ I^{e\sigma} Y_e \frac{\partial A}{\partial Z^\sigma} \right\} = 4\pi J \quad (4.92)$$

generál (lásd (3.47)-et). A D'Alembert-operátor inverziója miatt — ami akkor lép föl, amikor  $j_a$ -ról  $\alpha_a$ -ra térünk át — a (4.91) jobb oldalán álló diagramot a


(4.93)

Feynmann-féle diagram megfelelőjének tekinthetjük. Végül  $j_{AA'} = \psi_A \chi_{A'}$ -t helyettesítve — ahol  $\psi_A$  és  $\chi_A$  1/2 spinű tömeg nélküli terek, melyeket rendre a  $-3$  homogenitási fokú  $p(Y_\alpha)$  és  $h(Z^\alpha)$  twistorfüggvények generálnak — (4.91)-et és (4.93)-at a következőképpen írhatjuk fel:


(4.94)

ami a tömeg nélküli elektronok közötti Möller-szórás twistorváltozata [19]. Ugyanez elemi állapotokkal felírva:


(4.95)



### 5. A görbült tér twistorai

A twistorelmélet görbült téridőre való adaptálására több különböző, de egymással kapcsolatban álló eljárás létezik. Négy különböző twistorfogalmat ismertettek itt, megmutatva a közöttük fennálló összefüggéseket. E twistorfogalmak a következők:

- a) lokális twistorok,
- b) globális nulla-twistorok,
- c) hiperfelületi twistorok,
- d) aszimptotikus twistorok.

Természetesen megnyugtatóbb volna, ha a twistoroknak görbült térben való használatát egyetlen „kétségszűrőhatárolt helyes” eljárás írta elő. A nehézség onnan ered, hogy a lapos tér twistorait leíró eljárások csődöt mondanak, ha a tér görbültté válik. Például: az általános relativitáselméletben egy téridő pont körül a rendszer impulzusmomentumának nincs kielégítő definíciója, ezért egy (2.11)-hez hasonló definíció valószínűleg alkalmatlan. Mint másik közelítés, esetleg szóba jöhetne a (2.13) twistoregynlet, amelyben  $\nabla_{BB'}$  a kovariáns derivált. Ennek használatakor azonban egy  $0 = \nabla^{B'}(C \nabla_{B'}^B \omega^A) = -\psi^{ABC} \omega^D$  alakú konzisztencia-feltétel lép fel, amelyben  $\psi_{ABCD}$  a konform spinor, s ezt a  $C_{abcd}$  Weyl-féle konform tenzorral a (3.8) összefüggés kapcsolja össze. Ez viszont vagy azt vonja maga után, hogy  $\omega^A = 0$  vagy azt, hogy a konform tenzornak igen speciális alakja van („nulla”-típusú) és ezenkívül  $\omega^A$  is igen speciális módon függ vele össze (a „zászlórúdja” a  $\psi_{ABCD}$  négyszeres fényszerű főirányba esik). És ha még mindez teljesül is, (2.13) akkor is csak kivételes esetekben tesz lehetővé zérustól különböző megoldásokat és ha van ilyen megoldás — kivéve a  $\psi_{ABCD} = 0$  esetet —, akkor az egy arányossági tényezőtől eltekintve egyértelmű. Tehát a (2.13) twistoregynlet egy általános twistorra csak akkor ad kielégítő definíciót, ha  $\psi_{ABCD} = 0$ , ami annak feltétele, hogy a téridő *konformisan lapos* legyen. Sőt, (2.13)-nak valószínűleg egyetlen olyan változata sincs, amelynek az egész téridőben definiált megoldásai-ból ilyen definíció előállítható volna.

Egy másik lehetőség az volna, hogy csak a *nulla*-twistorokat vesszük figyelembe, majd azzal a kézenfekvő általánosítással élünk, hogy egy  $M^I$ -den levő  $Z$  fényszerű egyenesnek egy — az  $\mathcal{M}$  görbült téridőben elhelyezkedő —  $Z$  fényszerű geodetikus vonalat feleltetünk meg. A  $\pi_{A'}$  spinort, amely a twistor fázis- és impulzus-skálázását határozza meg, ekkor  $Z$  mentén a  $Z$ -t érintő  $p_{AA'} = \bar{\pi}_A \pi_{A'}$  impulzusvektorral kell definiálni és a  $\pi_{A'}$  spinornak  $Z$  iránya mentén párhuzamosan kell terjednie. (Ez konformisan invariáns; lásd (2.17)-et). Egy  $\mathcal{M}$ -ben levő *globális nulla-twistor*nak valóban ez a definíciója. Úgy tűnik azonban, hogy nincs egységes eljárás arra az esetre, ha ezt a definíciót nem nulla-twistorra akarjuk kiterjeszteni vagy (ami ezzel összefügg): nincs olyan egyértelmű eljárás, amellyel a globális twistortérhez komplex szerkezetet rendelhetünk, még abban az esetben sem, ha a nem-nulla twistorok valamilyen módon már adóttak. A későbbiekben — nem túlságosan részletekbemenően — látni fogjuk e nehézségek geometriai okait, valamint azok részleges feloldását, s ez utóbbiban felhasználjuk majd a hiperfelületi és az aszimptotikus twistorok fogalmát. Ez a probléma szembenáll egy másik közelítéssel is, amit a twistoroknak a görbült téridőbe való bevezetésére használhatnánk, nevezetesen azzal, hogy megkeressük a  $CM$ -ben levő, (2.28)-cal definiált,  $CZ$  teljesen fényszerű komplex síkok megfelelőit. Ha feltesszük, hogy  $\mathcal{M}$  metrikája analitikus, akkor a neki megfelelő komplex  $CM$  felírható, — de teljesen fényszerű síkokat általában nem tartalmaz. És ismét: az integrálhatósági feltétel ezekre a síkokra



vonatkozólag akkor áll fenn, ha  $\psi_{ABCD}$  konform spinor eltűnik. Megint arra az eredményre jutottunk tehát, hogy egy céljainknak megfelelő twistorfogalom létezésének kétségkívül az a feltétele, hogy  $\mathcal{M}$  konformisan lapos legyen.

Azt is mondhatná valaki, hogy a twistorok valójában egyáltalán nem alkalmasak a konformisan görbült téridő tárgyalására. Ennek a nézetnek elfogadása azonban azt jelentené, hogy a twistorprogramról — mint a természet alapvetőbb törvényeinek leírására irányuló megközelítésről — lemondunk. Mert az a tény, hogy a makroszkopikus téridő konform szerkezete, — még akkor is, ha az Einstein-féle téregyenleteket esetleg módosítani kell — *igenis* görbült, kísérletileg igazoltnak tekintendő. A Nap gravitációs terének következtében fellépő (a frekvenciától független) fényelhajlási és időkései jelenségek arra utalnak, hogy a fizikai téridő fénykúp-szerkezete valószínűleg más, mint a Minkowski-téré. De a pusztá hit a twistorprogram esetleges sikerében nem volna elégséges! Bizonyosan szükség van valamilyen reménykeltő bátorításra a konformisan görbült téridő geometriai elemzéséből, főleg az Einstein-féle egyenletek megoldásaival kapcsolatban. A globális, hiperfelületi és aszimptotikus twistorok geometriai struktúrája — véleményem szerint — éppen ezt a szükséges bátorítást nyújtja.

Mielőtt megtárgyalnánk azonban ezt a szerkezetet, ajánlatos megvizsgálni az előzőktől kissé eltérő lokális twistor [19] fogalmát. A lokális twistorok nem tekinthetők az  $\mathcal{M}$ -hez tartozó lapos-tér twistorok keresett általánosításának. Minden egyes lokális twistor az  $\mathcal{M}$  egy pontjában van definiálva, így a lokális twistorokat nem használhatjuk egyfajta elemi fogalomként, amelyből  $\mathcal{M}$  pontjai felépítendőek. A lokális twistorok mégis lehetővé teszik egy jóldefiniált és konformisan invariáns kalkulus kidolgozását, amely — különösen az asszimptotikus twistorok tárgyalására — igen alkalmas.

A  $Z^\alpha$  lokális twistort a  $P \in \mathcal{M}$  pontban az  $\omega^A, \pi_A$  spinorpárral lehet leírni; az  $\mathcal{M}$ -en levő  $g_{ab}$  metrikára vonatkozólag  $P$ -ben

$$Z^\alpha \leftrightarrow (\omega^A, \pi_{A'}), \quad (5.1)$$

ha a metrikát (2.15) és (2.16) szerint konformisan átskálázzuk, akkor  $Z^\alpha$  alakját (2.19) mintájára meg kell változtatnunk:

$$Z^\alpha \leftrightarrow (\hat{\omega}^A, \hat{\pi}_{A'}) = (\omega^A, \pi_{A'} + i\gamma_{AA'}\omega^A), \quad (5.2)$$

amelyben  $\gamma_a$ -t (2.18) definiálja. Ha  $\mathcal{M}$  különböző pontjaiban adott lokális twistorokat akarunk összehasonlítani, szükségünk van egy  $\mathcal{M}$ -ben levő és  $t^a$  érintő vektorú  $\tau$  görbe mentén végbemenő *lokális twistor-transzport* fogalmára:

$$\begin{aligned} t^b \nabla_b \omega^A &= -i t^{AB'} \pi_{B'} \\ t^b \nabla_b \pi_{A'} &= -i P_{BB' AA'} t^{BB'} \omega^A, \end{aligned} \quad (5.3)$$

ahol

$$P_{ab} = \frac{1}{12} R g_{ab} - \frac{1}{2} R_{ab}.$$

Az  $R_{ab} = R_{acb}{}^c$  Ricci-tenzor előjelét az  $R_{abc}{}^d v^c = (\nabla_a \nabla_b - \nabla_b \nabla_a) V^d$  összefüggés definiálja. Felhívjuk a figyelmet arra, hogy a  $\tau$  görbe mentén végbemenő lokális twistor-transzport művelete tulajdonképpen nem azt jelenti, hogy maga a twistor mozog a  $\tau$  görbe mentén, hanem az a pont, („origó”) amelyhez a twistor tartozik.



Általánosabban kifejezve, egy  $\mathcal{M}$ -en levő lokális twistor-tér kovariáns deriváltját a  $t^a$  irányban a következőképpen definiálhatjuk

$$t^b \nabla_b Z^a \leftrightarrow (t^b \nabla_b \omega^A + i t^{AB'} \pi_{B'}, t^b \nabla_b \pi_{A'} + i P_{BB' AA'} t^{BB'} \omega^A). \quad (5.4)$$

A kovariáns derivált fogalmának konform invarianciája alábbi módon igazolható: ha a metrikát (2.15) szerint konformisan újráskáláztuk és  $Z^a$  felírása megfelel (5.2)-nek, akkor  $Z^a$  kovariáns deriváltja is megfelel (5.2)-nek. Ebből következik, hogy a lokális twistor-transzport is konformisan invariáns.

Ha (5.4)-et összehasonlítjuk (2.14)-gyel, azt látjuk, hogy az  $M^I$  sík téridőben a lokális twistorok *állandók* és pontosan megfelelnek a 2. § eredeti twistorainak. A lokális twistor-transzport tehát azt írja le, hogyan változik egy spinorpárral adott twistor reprezentációja, ha a referenciapont (az origó) mozog. A konform invarianciából következik, hogy az előbbi állítás akkor is igaz, ha  $\mathcal{M}$  csak konformisan sík. De ha  $\mathcal{M}$  konformisan görbült, nem valószínű, hogy sok olyan lokális twistort találunk, amely zérustól különböző és konstans. Ha egy lokális twistort (illetve annak leírását) lokális twistor-transzporttal körülvezetjük egy kis hurkon, akkor az általában nem tér vissza kiindulási állapotába. Levezethető a következő összefüggés:

$$\begin{aligned} & [t^p \nabla_p, u^q \nabla_q] Z^\beta - [t, u]^p \nabla_p Z^\beta \\ & \leftrightarrow t^p u^q \{ \varepsilon_{p' Q'} \psi_{p Q A}{}^B \omega^A, -i(\varepsilon_{p Q} \nabla_{A A'} \bar{\psi}'_{B' P' Q'}{}^{A'} + \varepsilon_{p' Q'} \nabla_{B B'} \psi_{A P Q}{}^B) \omega^A \\ & \quad - \varepsilon_{p Q} \psi_{p' Q' B'}{}^{A'} \pi_{A'} \} \end{aligned} \quad (5.5)$$

ahol  $[t, u]^b$  a  $(t^c \nabla_c u^b - u^c \nabla_c t^b)$  Lie-zárójelet jelenti. Ez ismét arra mutat, hogy az  $M$ -en globálisan definiálendő twistorokra érvényes integrálhatósági feltétel nem más, mint  $\psi_{ABCD} = 0$ , ez pedig a konform laposság feltétele.

A lokális twistor-transzport, vagy a kovariáns derivált fogalmát — (5.3) és (5.4) konjugált komplexét véve — alkalmazhatjuk egy  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$  valenciájú  $W_\alpha$  twistorra is. Igazolható, hogy

$$t^b \nabla_b (Z^\alpha W_\alpha) = Z^\alpha t^b \nabla_b W_\alpha + W_\alpha t^b \nabla_b Z^\alpha \quad (5.6)$$

a bal oldalon álló tag jelöli a  $Z^\alpha W_\alpha$  skalár  $\tau$  mentén vett közönséges deriváltját. (5.6)-ból következik, hogy — ha  $\tau$  mentén lokális twistor-transzportot alkalmazunk — két twistor skalárszorzata a  $\tau$  mentén konstans marad.

Most térjünk vissza a fentebb definiált globális nulla-twistor fogalmához. A geometria számára meg kell adnunk az  $\mathcal{M}$ -ben levő nulla-twistorok halmazának  $\mathcal{N}$  terét. Hogy ez céljainknak megfelelően,  $\mathcal{N}$ -et mint egy Hausdorff-féle hét-sokaságot adjuk meg, ugyanakkor kikötjük, hogy  $\mathcal{M}$  eleget tegyen bizonyos globális oksági követelményeknek. Egyszerűség kedvéért felteszem, hogy  $\mathcal{M}$  globálisan hiperbolikus [42] és ennyi elég is lesz. Jegyezzük meg, hogy az  $\mathcal{M}$ -ben levő skálázatlan\* fényszerű geodetikus vonalak  $P\mathcal{N}$  tere 5 dimenziós;  $\pi_{A'}$  fennmaradó szabadsági foka, ami egy komplex szorzó,  $\mathcal{N}$  dimenzióját 7-nek adja.

$\mathcal{N}$  most egy  $\omega$  zárt 2-alakot tartalmaz:

$$\omega = dp_a \wedge dx \quad (5.7)$$

\* Egy skálázatlan geodetikus vonalat az  $\mathcal{M}$ -en levő ponthalmaznak tekinthetünk. A skálázott geodetikus vonal egy párhuzamosan terjedő érintővektort is hordoz, ami valójában egy affin paraméter, amelynek kezdőpont-szabadsági fokától eltekintünk.



amelyben  $p_{AA'} = \bar{\pi}_A \pi_{A'}$ . A (5.7) kifejezés először  $\mathcal{M}$  kotangens-nyalábján definiálható [43], de a geodetikus vonalak mentén konstans marad (Lagrange-féle identitás [43], és a skálázott geodetikus vonalak terében kétalakot határoz meg. Ha ez a kétalak a  $\pi_{A'} \mapsto e^{i\theta} \pi_{A'}$  transzformáció után konstans marad ( $\theta$ -ról feltéve, hogy valós), akkor megkapjuk  $\underline{\omega}$  definícióját az  $\mathcal{N}$  térben. Az  $\underline{\omega}$  — geometriailag egy kongruencia (nyaláb) rotációs fokát definiálja. Ez (5.7) kis átalakításával azonnal látható; ugyanis a geodetikus vonalak egy nyalábjá (ekkor  $p_a$ -ból egy  $M$ -en levő tér lesz) az

$$\underline{\omega} = \nabla_{[a} p_{b]} dx^a \wedge dx^b \quad (5.8)$$

alakban írható fel, amelyben a  $\nabla_{[a} p_{b]}$  mennyiség  $p_a$  rotációját definiálja.

Az (5.7) kifejezés tulajdonképpen a

$$\underline{\Phi} = p_a dx^a \quad (5.9)$$

egyalak külső deriváltja, amiből

$$\underline{\omega} = d\underline{\Phi} \quad (5.10)$$

és  $\underline{\Phi}$  is jól definiált a skálázott fényszerű geodetikus vonalak terében [5].  $\underline{\Phi}$  továbbá definiálva van  $N$ -ben és a  $\pi_{A'} \mapsto e^{i\theta} \pi_{A'}$  transzformáció után változatlan marad.  $\underline{\Phi}$  geometriai jelentése a következő: a skálázott fényszerű geodetikus vonalak egy (1 paraméteres) családjában méri az „idő-késést”.  $\underline{\Phi} = 0$ , ha a család fényszerű hiperfelülethez tartozik.

$\underline{\omega}$ -t és  $\underline{\Phi}$ -t a sík téridőben twistorokkal a következőképpen írhatjuk fel:

$$\begin{aligned} \underline{\omega} &= idZ^\alpha \wedge d\bar{Z}_\alpha \\ \underline{\Phi} &= iZ^\alpha d\bar{Z}_\alpha \end{aligned} \quad (5.11)$$

és e kifejezések lehetővé teszik, hogy definíciójukat nem-nulla twistorokra is kiterjesszük.  $\underline{\Phi}$  kiterjesztésére két további tehetőség is volna, nevezetesen, ha a fenti kifejezés helyett a  $-i\bar{Z}_\alpha dZ$  vagy a szimmetrikusabb  $\frac{1}{2} (iZ^\alpha d\bar{Z}_\alpha - i\bar{Z}_\alpha dZ^\alpha)$  formulát használnánk, mivel e két utóbbi alak csak  $d(Z^\alpha \bar{Z}_\alpha)$ -nek — ami eltűnik  $N$ -en — egy többszörösében különbözik  $\underline{\Phi}$ -től. E két lehetőség egyike természetesen  $\underline{\Phi}$  konjugált komplexé, a másik pedig annak valós része. A  $\underline{\Phi}$ , az  $\underline{\omega}$  és a  $2s = Z^\alpha \bar{Z}_\alpha$  skalár definiálják az  $T$  twistor-térnek *invariáns szerkezet* néven már említett [32] tulajdonságát.  $\omega$ -t természetesen — (5.10) szerint —  $\underline{\Phi}$  definiálja, de csak  $\underline{\omega}$ -hoz kötött az az érdekesség, hogy  $T$  számára egy *szimplektikus szerkezetet* [43] definiál. Ha az  $N$  altérre korlátozzuk vizsgálatainkat, akkor  $\underline{\omega}$  csak egy úgynevezett *preszimplektikus szerkezetet* definiál, mert az általa definiált mátrix elfajult (mivel  $N$  dimenziója páratlan). Ha  $N$ -ből kiemeljük a fázisköröket,

$$Z^\alpha \mapsto e^{i\theta} Z^\alpha \quad (\theta \text{ valós}), \quad (5.12)$$

akkor a tér átmegy a skálázott fényszerű geodetikus vonalak hatdimenziós terébe, és  $\underline{\omega}$  ebben a térben ismét szimplektikus szerkezetet definiál.

Az „invariáns szerkezet” kifejezést azért használjuk, mert — legalább is akkor, midőn  $\mathcal{N}$ -re korlátozzuk vizsgálatainkat — ennek a szerkezetnek invariáns tulajdonsága van (mint ezt fentebb már láttuk) *gömbült* téridő esetében is (amikor  $\mathcal{N}$  átveszi  $N$  szerepét). Vegyük például a sík tér két tartományát, amelyeket gömbült tartomány vá-



laszt el egymástól. A twistortérben (5.11) segítségével lehet definiálni  $\omega$ -t és  $\Phi$ -t mindkét lapos (sík) tartományban. Mivel ezeket ( $N$ -ben) (5.7) és (5.9) alakba át lehet írni, — és felhasználva kifejezéseik ismert terjedési tulajdonságait — a két sík tartományban érvényes definícióinak meg kell egyeznie azon részeiben, amelyekre mindkét definíció vonatkozik. A  $T$ -tér *nem-nulla* részeivel kapcsolatos nehézség abban áll, hogy nincs még olyan módszer, amelynek segítségével egy nem-nulla twistort át lehet vinni egy sík tartományból a görbült téridő egy tartományán át egy másik sík tartományba. (A [32] irodalmi hivatkozásban láthatjuk, hogy az Einstein-féle egyenleteket kielégítő hullámok néhány meghatározott esetében erre mégis van mód.)

Úgy látszik, hogy  $\mathcal{N}$  fentebb definiált invariáns szerkezete az  $\mathcal{M}$ -ben lokálisan definiált és  $\mathcal{N}$  számára megadható legerősebb szerkezet, amelyet a téridő-görbület nem tesz tönkre. A szimplektikus szerkezet azonban sokkal gyengébb, mint a *komplex* szerkezet [43], amire pedig szükségünk van olyan típusú kontúrintegrálok definiálásakor, amilyeneket a 3. és 4. paragrafusban láttunk. A komplex szerkezet nélkül a twistor-formalizmus igen kis része maradna meg. Érdemes tehát megvizsgálni a komplex szerkezet téridő-tartalmát a  $T$  sík twistortér esetében és felbecsülni e fogalom görbült esetre kiterjesztésekor fellépő nehézségeket.

Egy halmazra vonatkozó komplex szerkezet olyan szabálynak fogható fel, amelynek segítségével eldönthetjük, hogy a halmaz egy nyílt alhalmazán definiált komplex függvény mikor „holomorf”. (Ennek a szabálynak bizonyos tulajdonságokkal kell rendelkeznie, többek között például azzal, hogy ilyen „holomorf” függvények bármilyen összességének — a szokásos értelemben véve — egy holomorf függvénye szintén holomorf. Lokálisan bevezethetünk holomorf koordinátákat; ebben az esetben a szabály kimondja, hogy a halmaz nyílt alhalmazain definiált holomorf függvények ezen koordinátákban is holomorfok.) Ez azt jelenti, hogy ha sikerül kidolgoznunk egy geometriai eljárást, amelynek segítségével meg tudjuk mondani egy  $T$ -n levő függvényről, hogy holomorf-e, akkor  $T$  komplex szerkezetének geometriai értelmet adtunk. Vizsgálataink csak a  $T$ -n levő homogén holomorf függvényekre terjednek ki és csak az  $f(Z^\alpha)$  függvények azon zérushelyeinek halmazát fogjuk értelmezni, amelyek a nulla-twistorok  $N$  teréhez tartoznak. Azok a nulla-twistorok, amelyekre  $f(Z^\alpha)=0$ ,  $M$ -ben a fényszerű egyenesek egy kongruenciáját (nyalábját) definiálják.  $f$  holomorf természetéből — a Kerr-tétel [20] alapján — következik, hogy ez *nyírásmentes* kongruencia. Ez azt jelenti, hogy egy, a kongruencia irányára merőleges kistérszerű kör úgy terjed a kongruencia mentén, hogy nem torzul el ellipszissé. Nyugodtan mondhatjuk, hogy  $T$  komplex szerkezetének lényegét a nyírásmentesesség előbbi feltétele tartalmazza. A fennmaradó rész a  $T - \{0\} \rightarrow PT$  vetítésben fellépő szálak, vagyis a  $Z^\alpha \rightarrow \lambda Z^\alpha$  multiplikátorok egydimenziós komplex vektorterével, illetve a  $\pi_A \rightarrow \lambda \pi_A$  átmenet komplex szerkezetével kapcsolatos.

Ha most áttérünk a görbült  $\mathcal{N}$  esetére, azonnal észrevesszük, hogy a megoldásra váró feladat igen komoly. A nehézséget megint a téridő konform görbülete okozza. A fényszerű geodetikus vonalak egy nyalábja, mely nyírásmentesen indul, majd belép egy konform görbületű tartományba, a másik oldalon (igen speciális körülmények kivételével) zérustól különböző nyírással fog kilépni. Ez láthatótag eltér a forgás esetétől, amit fentebb az  $\omega$  szimplektikus kifejezéssel definiáltunk. A fényszerű geodetikus vonalak egy rotációmentes nyalábja rotációmentes marad, bármilyen görbületen is halad át. (Egy rotáció nélküli fényszerű nyaláb valóban fényszerű hiperfelületek egy családjának generátoraiból áll.) Tehát: a twistortér szimplektikus szerkezete az  $\mathcal{M}$ -ben levő görbület hatásaira invariánsnak tekinthető, de a komplex szerkezet — mikor a



fényszerű geodetikus vonalak egy konform görbületű tartományon haladnak át — „eltolódik”.

Egy régebbi cikkben [32] megállapítottuk, hogy a twistortér komplex szerkezetének csak akkor van fontos szerepe, mikor a természet kvantumos szerkezetét vizsgáljuk. Klasszikus szinten esetleg figyelembe kell vennünk a  $Z^\alpha, \bar{Z}_\alpha$  nem holomorf mennyiségeket, de kvantumos szinten a  $Z^\alpha, -\partial/\partial Z^\alpha$  „holomorf” párnak lehet jelentősége (a komplex konjugáció műveletének itt nincs szerepe). Előbbieket illetően felfogásom nem változott lényegesen, de úgy érzem, hogy — ami a holomorf twistor-elmélet klasszikus szinten való alkalmazását illeti — indokolatlanul pesszimista voltam, különösen azokban az esetekben, mikor az Einstein-féle egyenletek megoldásai is fellépnek. A helyzetet most azért látom reménykeltőbbnek, mert a klasszikus görbült téridőn belül, a twistor-holomorfiái meggondolások alkalmazását illetően már több eredményünk van.

Először is: a konform görbület fogalmával most már pontosabbá tehető az  $\mathcal{N}$ -en bevezetett komplex szerkezet „eltolódás”-ának meglehetősen pontatlan fogalma. Gondolatmenetünkben megmutatjuk, — először csak egy, az  $\mathcal{M}$  téridőben elhelyezkedő (lehetőleg térszerű) hiperfelületre vonatkozólag — hogy egy jól definiált komplex szerkezettel bíró  $\mathcal{T}(\mathcal{S})$  „twistorteret” tulajdonképpen hogyan lehet definiálni. Ha  $\mathcal{S}$  elmozdul egy másik,  $\mathcal{S}'$ , helyzetbe, akkor egy másik,  $\mathcal{T}(\mathcal{S}')$ , komplex teret kapunk. Mivel  $\mathcal{N} \subset \mathcal{T}(\mathcal{S})$  (feltéve, hogy  $\mathcal{M}$  globálisan hiperbolikus és  $\mathcal{S}$  térszerű Cauchy-felület) és ugyanakkor  $\mathcal{N} \subset \mathcal{T}(\mathcal{S}')$ , így  $\mathcal{N}$  két különböző szerkezetre tesz szert: egyre a  $\mathcal{T}(\mathcal{S})$ , egyre a  $\mathcal{T}(\mathcal{S}')$  komplex négydimenziós sokaságból. Az ilyen  $\mathcal{T}(\mathcal{S})$  tér elemeit *hiperfelületi twistoroknak* nevezzük.

Tegyük fel, hogy  $\mathcal{M}$  egy analitikus téridő,  $\mathcal{S}$  pedig egy analitikus hiperfelület  $\mathcal{M}$ -ben. (Reméljük, hogy az  $\mathcal{S}$  analitikusságára vonatkozó előbbi feltételre végül nem lesz szükség. Jelenleg mégis ez mutatkozik az egyetlen biztosan járható útnak.) Előállítható ezen halmazok  $\mathcal{CM}$  és  $\mathcal{CS} (\subset \mathcal{CM})$  komplex megfelelői, de nem hisszük, hogy az  $\mathcal{M} \subset \mathcal{CM}, \mathcal{S} \subset \mathcal{CS}$  valós térrészekről nagyon „messze” mehetnénk anélkül, hogy (mondjuk a komplexszé tett metrikában szingularitásokkal ne találkozzunk.  $\mathcal{CM}$ -et és  $\mathcal{CS}$ -et úgy kell elképzelnünk, mint  $\mathcal{M}$ , illetve  $\mathcal{S}$  megvastagodását. Egy pillanatra tegyük fel, hogy  $\mathcal{M}$  lapos. Ekkor bármely  $\mathcal{M}$ -ben levő  $Z^\alpha$  twistor definiál egy teljesen fényyszerű CZ síkot és egy  $\pi_{A'}$  spinort. Ugyanakkor  $Z^\alpha$ -t magát is egy ugyanilyen pár definiálja, mégpedig oly módon, hogy a CZ-hez húzott érintővektorok  $\xi^A \pi^{A'}$  alakúak. A  $\pi^{A'}$  spinor CZ-ben mindenütt konstans, így konstans a CZ-nek a  $\mathcal{CS}$ -sel való metszésekor előálló (komplex)  $\zeta$  görbe mentén is.  $n^a$  legyen merőleges  $\mathcal{CS}$ -re. Így minden  $\zeta$ -hoz húzott  $t^a$  érintő merőleges  $n^a$ -ra és  $\xi^A \pi^{A'}$  alakú. Ezt megkapjuk, ha

$$t^{AA'} = n^{AB'} \pi_{B'} \pi^{A'} \quad (5.13)$$

így annak feltétele, hogy  $\pi_{A'} \zeta$  mentén konstans legyen:

$$n^{AB'} \pi_{B'} \pi^{A'} \nabla_{AA'} \pi_{C'} = 0 \quad (5.14)$$

(5.14) nemcsak azt mondja ki, hogy  $\pi_{A'}$  a  $\zeta$  mentén konstans, hanem egy differenciálegyenletet szolgáltat magára  $\zeta$ -ra is (ha ugyanis  $n^a$  adott,  $\zeta$  irányát (5.13) definiálja). Így (5.14) különböző megoldásai  $\mathcal{CS}$  mentén  $\mathcal{M}$  azon twistorait definiálják, amelyek illeszkednek  $\mathcal{CS}$ -hez. (Ezek a meggondolások nagyrészt lokális jellegűek, ezért a  $\mathcal{CS}$ -hez nem illeszkedő twistorokkal itt nem foglalkozom.) Akár sík az  $\mathcal{M}$ , akár nem, ugyanazt a gondolatmenetet követhetjük. (5.14) megoldásainak  $\mathcal{CS}$ -en



levő tere a keresett  $\mathcal{T}(\mathcal{S})$  hiperfelületi twistortér, amelynek megoldásait hiperfelületi twistoroknak nevezzük.

Figyeljük meg, hogy (5.14)-ben semmiféle utalás nincs a konjugált komplex képzés műveletére. Ebből következik, hogy  $\mathcal{T}(\mathcal{S})$  (feltéve, hogy az utóbbi egy sokaság, de általában az) kanonikus értelemben *komplex* halmaz kell hogy legyen, ami lehetővé teszi komplex számokkal szorzás egy fajta műveletét; tehát: ha  $Z' \in \mathcal{T}(\mathcal{S})$  megfelel  $\pi_{A'}$ -nek  $\zeta$  mentén, s ez utóbbi kielégíti (5.14)-et, akkor  $qZ' \in \mathcal{T}(\mathcal{S})$  megfelel  $q\pi_{A'}$ -nek ugyanazon  $\zeta$  mentén ( $q \in \mathbb{C}$ ). Így vizsgálatainkba bevonhatunk egy  $\mathbf{P}\mathcal{T}(\mathcal{S})$  projektív hiperfelületi twistorteret is, ami a  $\zeta$  görbék terének tekinthető, mivel az egymással arányos hiperfelületi twistorok ekvivalencia osztályának a tere. Nem szabad elfelejtenünk, hogy  $\mathcal{T}(\mathcal{S})$ -ben kell lennie egy  $0'$  zéruselemnek nevezett speciális elemnek is, amely  $\mathbf{P}\mathcal{T}(\mathcal{S})$  egyetlen elemének sem felel meg. Minden  $Z' \in \mathcal{T}(\mathcal{S})$ -hez definiálunk egy  $0Z' = 0'$ -t; de azt már nem engedjük meg, hogy  $\pi_{A'} = 0$  legyen.  $\mathcal{T}(\mathcal{S})$  vagy  $\mathbf{P}\mathcal{T}(\mathcal{S})$  egy elemét nullának nevezzük, ha a  $\zeta$  görbe egy valós pontot ( $\mathcal{S}$  egy pontját) tartalmazza. Ha  $\mathcal{S}$  térszerű és  $\mathbf{C}\mathcal{S}$  „vastagítása” „vékony”, akkor egyik  $\zeta$  görbe sem tartalmaz egynél több valós pontot. Az ilyen egy valós pontot tartalmazó görbék  $\mathbf{P}\mathcal{N}(\mathcal{S})$  rendszere 5 valós dimenziójú; a  $\zeta'$ -k megfelelő  $\mathcal{N}(\mathcal{S})$  rendszere a hozzá tartozó  $\pi_{A'}$ -kkel együtt 7 valós dimenziós. Az egész  $\mathcal{T}(\mathcal{S})$  tér 4 komplex (vagy 8 valós) dimenziós,  $\mathbf{P}\mathcal{T}(\mathcal{S})$  pedig 3 komplex (vagy 6 valós) dimenziós.

Az  $\mathcal{N}(\mathcal{S})$  tér kanonikusan azonosítható a globális nulla-twistorok  $\mathcal{N}$  terével (feltéve, hogy  $\mathcal{M}$  globálisan hiperbolikus,  $\mathcal{S}$  pedig szigorú értelemben vett Cauchy-féle hiperfelület — mert különben némi módosítás szükséges). Ez azért van így, mert  $\pi_{A'}$  a  $\zeta$  valós pontjában (midőn  $Z' \in \mathcal{N}(\mathcal{S})$ ) egy fényszerű geodetikus vonalat definiál  $\mathcal{M}$ -ben, amely ezen a ponton — a  $p^{AA'} = \bar{\pi}^A \pi^{A'}$ -vel egyértelműen definiált — valós fényszerű irányban halad át. Ha  $\pi_{A'}$  spinort ezen fényszerű geodetikus vonal mentén párhuzamosan elterjesztjük, akkor ezzel — mint várjuk —  $\mathcal{N}$ -nek egy és csak egy elemét definiáljuk. Megfordítva:  $\mathcal{N}$  minden eleme egy fényszerű geodetikus vonalat és egy  $\pi_{A'}$ -t definiál. A fényszerű geodetikus vonalnak  $\mathcal{S}$ -sel csak egy metszéspontja van, amelyen csak egy  $\mathbf{C}\mathcal{S}$ -hez tartozó  $\zeta$  görbe halad át és e görbét abban a pontban  $\pi_{A'}$  egyértelműen definiálja. Ez az alapja annak, hogy  $\mathcal{N}(\mathcal{S})$ -et  $\mathcal{N}$ -nel kanonikusan azonosítottuk. De  $\mathcal{N}(\mathcal{S})$  örökölt egy szerkezetet a  $\mathcal{T}(\mathcal{S})$  komplex halmazból is, amelybe be van ágyazva. Itt rájövünk, hogy az  $\mathcal{S}$  hiperfelület tulajdonképpen éppen azt a rég óhajtott szerkezetet bocsátja rendelkezésünkre, ami  $\mathcal{N}$  definíciójából hiányzott; nevezetesen bizonyos nullától különböző twistorokat, amelyek az  $\mathcal{N}$  térhez adva egy négy komplex dimenziós halmazt hoznak létre. Ez a szerkezet — általános téridőben — nagy mértékben függ  $\mathcal{S}$  megválasztásától. Ha  $\mathcal{S}$  egy másik,  $\mathcal{S}'$ , helyzetbe megy át, akkor  $\mathcal{N}$  szerkezete megváltozik, ami a — korábban már említett — komplex szerkezet „eltolódásának” nyilvánvaló megvalósulása.

A szerkezetnek ez az eltolódása csak a konformisan sík téridő esetében nem lép fel. Hogy ezt belássuk, hasznos lesz megvizsgálni a hiperfelületi twistorokra vonatkozó Kerr-tételt. Mivel rendelkezésünkre áll egy jól definiált  $Z' \rightarrow qZ'$  holomorf művelet, beszélhetünk homogén holomorf függvényekről  $\mathcal{T}(\mathcal{S})$ -en. Így vizsgálat tárgyává tehetjük azokat a helyeket  $\mathbf{C}\mathcal{T}(\mathcal{S})$ -en, amelyeket e homogén függvények eltűnése definiál. Mindezen helyek az  $\mathcal{S}$ -en levő  $\zeta$  görbék egy kongruenciájának (nyalábjának) felelnek meg; e nyaláb azon  $\zeta$  görbéi, amelyek tartalmaznak valós pontokat (amelyek  $\mathbf{P}\mathcal{N}(\mathcal{S})$ , illetve  $\mathbf{P}\mathcal{N}$  elemeit adják),  $\mathcal{M}$ -ben a fényszerű geodetikus vonalak egy nyalábját definiálják. A fényszerű geodetikus vonalak ilyen nyalábját az jellemzi, hogy az  $\mathcal{S}$ -sel való metszés helyén nyírásmentes. Hogy ezt belássuk, vizsgáljuk meg (5.14)-et;



a nyaláb mindegyik fényszerű geodetikus vonalához válasszunk ki egy megfelelő  $\pi_{A'}$ -t. Így  $\pi_{A'}$ -t mint az  $\mathcal{S}$ -en adott hely függvényét kapjuk.  $\pi_{A'}$  kiválasztásának ezt a módját kiterjeszthetjük  $\mathcal{CS}$  pontjaira is, ekkor  $\pi_{A'}$ -t mint egy, a  $\mathcal{CS}$ -en elhelyezkedő spinorteret kapjuk. (Hogy ezt megteheszük, szükséges, hogy a függvény  $\mathcal{T}(\mathcal{S})$ -en holomorf legyen.) Mivel ezeket a  $\pi_{A'}$ -ket a  $\zeta$  görbék egy nyalábjával asszociáltuk, (5.14) érvényességét fenn kell tartanunk annak kivételével, hogy a görbe egy pontjához ( $\pi_{A'}$  arányossági osztályából) önkényesen kiválasztott  $\pi_{A'}$  nem egyezhet meg  $\pi_{A'}$  skálázásával, amit pedig (5.14) megkövetel. Így jutunk el a csak  $\mathcal{S}$ -en érvényes

$$n^{AB'} \pi_{B'} (\pi^{A'} \pi^{C'} \nabla_{AA'} \pi_{C'}) = 0 \quad (5.15)$$

egyenlethez (a második  $\pi^{C'}$  beiktatására azért van szükség, hogy lerontsa a  $\pi_{C'}$ -hez tartozó arányossági tényező deriváltjából származó kifejezést). Az (5.15) egyenletnek most érvényesnek kell lennie az  $\mathcal{S}$ -re korlátozott  $\pi_{A'}$ -spinorterre vonatkozólag is. A kifejezés zárójelben levő részének eltűnését fogadjuk el [7, 20] annak jelzésére, hogy a  $p^{AA'} = \pi^{-A} \pi^{A'}$  érintővektorú fényszerű geodetikus vonalak kongruenciája „nyírásmentes”-e. A zárójel előtt álló  $n^{AB'} \pi_{B'}$  kifejezés valójában semmilyen szerepet sem játszik, mert ha az  $\mathcal{S}$ -en elhelyezkedő spinorteret kiterjesztjük az egész  $\mathcal{M}$ -re kiterjedő spinorterre, mégpedig úgy, hogy a  $p^a$  tér érinti a geodetikus vonalak egy nyalábját (kongruenciáját), akkor (5.15) érvényes marad mindig, valahányszor  $n^{AB'} \pi_{B'}$ -t  $\pi^{-A}$ -val helyettesítjük. Így (a spintér 2 dimenziós voltából) következik, hogy ugyanaz az egyenlet  $\mathcal{S}$ -en is érvényes, ha az  $n^{AB'} \pi_{B'}$  kifejezést teljesen elhagyjuk. Ez az alapja az  $\mathcal{S}$  hiperfelületre vonatkozó, általánosított Kerr-tételnek.

$\mathcal{T}(\mathcal{S})$  komplex szerkezetének fenti értelmezése alapján már érthető, hogy — ha  $\mathcal{M}$  konformisan sík — ez a szerkezet valóban „eltolódik”, ha az  $\mathcal{S}$  felület változik. Ennek — mint már az előzőekben említettük — az az oka, hogy a konform görbület miatt létrejön a fényszerű geodetikus vonalak egy nyalábja, mely eredetileg általában nyírásmentes és később elnyíródik a nyaláb mentén (Sachs-féle egyenlet) [7]. Ebből következik, hogyha egy  $\mathcal{N}$ -en levő komplex függvény a leszűkítése egy a  $\mathcal{T}(\mathcal{S})$ -en adott holomorf függvénynek, akkor általában nem leszűkítése egyetlen  $T(S')$ -n adott holomorf függvénynek sem — feltéve, hogy  $\mathcal{S}'$  és  $\mathcal{S}$  két különböző hiperfelület. Ha azonban  $\mathcal{M}$  konformisan sík, akkor  $N$  holomorf szerkezete ugyanaz lesz, bármelyik  $\mathcal{T}(\mathcal{S})$ -et is használtuk.

Definiálható egy  $\mathcal{T}^*(\mathcal{S})$  „duális” hiperfelület twistortér is a  $\mathcal{T}(\mathcal{S})$  definiálásával teljesen analóg gondolatmenettel, mindössze a vesszős és a vesszőtlen indexeket kell felcserélnünk (5.14)-ben

$$n^{BA'} \tilde{\pi}_B \tilde{\pi}^A \nabla_{AA'} \tilde{\pi}_C = 0. \quad (5.16)$$

Ez az egyenlet  $\mathcal{CS}$ -ben, annak mindegyik pontján át és a választott pontban felvett minden egyes  $\tilde{\pi}_A$ -hoz egy és csak egy komplex  $\zeta$  görbét határoz meg és a görbéhez húzott érintő iránya:  $n^{BA'} \tilde{\pi}_B \tilde{\pi}^A$ . Egy ilyen  $\zeta$  görbe és a  $\zeta$  mentén (5.16) szerint terjedő  $\tilde{\pi}_A$  együtt egy  $\tilde{Z}$ .  $\mathcal{T}^*(\mathcal{S})$  duális hiperfelület-twistort definiál. A betűk fölé tett hülámvonal („tilde”) azt jelenti, hogy a  $\tilde{\pi}_A$ ,  $\tilde{\zeta}$  és  $\tilde{Z}$ . mennyiségek függetlenek a  $\pi_{A'}$ ,  $\zeta$  és  $Z$  mennyiségektől, de a  $\tilde{\pi}_A = \pi_{A'}$ ,  $\tilde{\zeta} = \zeta$  speciális eset a  $Z$  hiperfelület-twistor  $\tilde{Z}$ . konjugált komplexét adja. A  $\mathcal{T}^*(\mathcal{S})$  térnek — éppen úgy, mint a  $\mathcal{T}(\mathcal{S})$ -nek komplex szerkezete van. De a  $Z \mapsto \tilde{Z}$ .-val definiált képzés  $T(S)$ -ről  $\mathcal{T}^*(\mathcal{S})$ -re antiholomorf.

Azon feltétel alapján, hogy  $\zeta$ -nak és  $\tilde{\zeta}$ -nak van egy közös pontja ( $e\mathcal{CS}$ ), a

$$Z \cdot \tilde{Z}. = 0 \quad (5.17)$$



összefüggéssel metszési relációt definiálhatunk  $Z \cdot \varepsilon T(S)$  és  $\bar{Z} \cdot \varepsilon T^*(S)$  között. A  $Z \cdot \bar{Z} = 0$  speciális eset a  $Z \cdot \varepsilon \mathcal{N}(\mathcal{S})$ -et definiálja, mégpedig azért, mert — ha a konjugált komplex képzésének műveletét  $\mathcal{C}\mathcal{M}$ -re és  $\mathcal{C}\mathcal{S}$ -re alkalmazzuk —  $\zeta\bar{\zeta}$ -ba megy át és  $\zeta$  és  $\bar{\zeta}$  bármilyen (szükségképpen egyetlen) metszéspontja önmagába kell hogy átmenjen. Ez a pont így szükségképpen valós és az eredmény ebből következik. Ha  $\mathcal{M}$  sík (vagy konformisan sík), (5.17) megegyezik (legalább is olyan twistorokra vonatkozólag, amelyekhez tartozó  $\mathcal{CZ}$  „elég közel” halad el  $\mathcal{S}$  mellett) a  $Z^* \bar{Z}_\alpha = 0$  szabványos relációval. A skalárszorzatra vonatkozólag — általános esetben, mikor  $Z \cdot \varepsilon \mathcal{T}(\mathcal{S})$  és  $\bar{Z} \cdot \varepsilon \mathcal{T}^*(\mathcal{S})$  tetszőleges elemek — még nem találtunk kielégítő definíciót, ami az (5.17) relációt úgy terjesztené ki, hogy az  $Z \cdot \bar{Z}$ -nak értéket adjon.

Mivel már rendelkezésünkre áll egy alkalmas  $\mathcal{T}(\mathcal{S})$  komplex tér, twistorok holomorf függvényeiből megszerkeszthetjük a zérus nyugalmi tömegű terekre vonatkozó (3.10) kifejezés analogonját. Ennek használhatósága pillanatnyilag eléggé kis területre korlátozódik, azonban, hiszen a kontúrintegrált (nyilván) csak olyan téridőpontokra vonatkozólag végezhetjük el, amelyek az  $\mathcal{S}$  (vagy a  $\mathcal{C}\mathcal{S}$ ) hiperfelületen vannak. Így valószínűleg csak a „kényszeregyenlet” típusú relációkat lehet ezen módon automatikusan kielégíteni és az  $\mathcal{S}$ -től távol eső terek terjedését nem. A kétváltozós twistorfüggvények esetében azonban a helyzet lényegesen jobb. Úgy látszik, hogy a (3.39)-ben szereplő  $M$ -re vonatkozó — (3.41) megoldásainak előállítására szolgáló — általánosítás igenis lehetséges. Itt  $F(W, Z^*)$  alakú holomorf függvényekkel foglalkozunk, amelyekben  $W \cdot \varepsilon \mathcal{T}^*(\mathcal{S})$  és  $Z \cdot \varepsilon \mathcal{T}(\mathcal{S})$ , vagyis

$$F: \mathcal{T}^*(\mathcal{S}) \times \mathcal{T}(\mathcal{S}) \rightarrow \mathbb{C} \quad (5.18)$$

alakú holomorf leképezésekkel. Mivel mind  $\mathcal{T}^*(\mathcal{S})$ -re, mind  $\mathcal{T}(\mathcal{S})$ -re a skalárszorzat előállítására vonatkozó művelet jól definiált, semmi akadálya sincs annak, hogy  $F$ -re vonatkozólag meghatározzuk a homogenitási követelményeket.  $\mathcal{S}$ -en vagy  $\mathcal{C}\mathcal{S}$ -en levő téridő-pontokra vonatkozó (3.39) kontúrintegrálok értelmezésével kapcsolatban sem merülnek fel megoldhatatlan nehézségek. Egy olyan módszerre van még szükség, amellyel a  $\mathcal{C}\mathcal{S}$ -en kívül fekvő pontokra vonatkozó kontúrintegrálok is értelmezhetők.

Vizsgáljuk meg a  $\mathcal{T}^*(\mathcal{S}) \times \mathcal{T}(\mathcal{S})$  teret, amelyre  $F$  definiálva van. Ez a tér 8 komplex dimenziós és jól definiált komplex szerkezete van. Van továbbá benne egy 7 komplex dimenziós

$$\mathcal{N}(\mathcal{S}) \subset \mathcal{T}^*(\mathcal{S}) \times \mathcal{T}(\mathcal{S}) \quad (5.19)$$

eltér, amely azokból a  $(\bar{Z}_\alpha, Z_\alpha)$  párokból áll, amelyekre fennáll a  $Z \cdot \bar{Z}_\alpha = 0$  metszési reláció. Az (5.19)-ben használt jelölés magyarázata a következő. Ha  $Z \cdot \bar{Z}_\alpha = 0$ , akkor mind a  $\zeta$ , mind a  $\bar{\zeta}$  görbén van egy  $P \in \mathcal{C}\mathcal{S}$  pontunk, valamint egy  $\pi_{A'}$ ,  $\pi_A$  spinorpárunk  $P$ -nél. Ez azt jelenti, hogy  $\mathcal{C}\mathcal{M}$ -ben  $P$ -n keresztül egy és csak egy olyan komplex fényszerű geodetikus vonal halad át, amelynek iránya megegyezik a  $\bar{\pi}_A \pi_A$  komplex fényszerű vektor irányával. Ekkor a  $\bar{\pi}_A$  és  $\pi_A$  spinorok párhuzamos terjesztéssel szállíthatók a geodetikus vonal mentén (a  $\mathcal{C}\mathcal{M}$  komplex metrikájával definiált komplex Riemann-féle kapcsolat alapján), így leírásunk megszabadul az  $\mathcal{S}$  hiperfelület speciális megválasztásától. Bármely másik, a szóban forgó fényszerű geodetikus vonalat metsző  $\mathcal{C}\mathcal{S}'$  komplex hiperfelület használható volna, csak a leírás ekkor  $\mathcal{T}^*(\mathcal{S}') \times \mathcal{T}(\mathcal{S})$ -re vonatkoznék. (Lásd a 8. ábrát). Ha  $\bar{Z}_\alpha = \bar{Z}_\alpha$ , akkor  $\bar{\zeta} = \bar{\zeta}$ ,  $P \in \mathcal{S}$ ,  $\bar{\pi}_A = \bar{\pi}_A$ , a fentebb említett fényszerű geodetikus vonalból valós  $Z$  fényszerű geodetikus vonal lesz és a leírás megegyezik egy  $(\varepsilon \mathcal{N})$  globális nulla-twistorra vonatkozó leírással. A fent leírt általánosabb eset — mikor nem szükséges, hogy  $\bar{Z}$  és  $\bar{Z}$  egybees-



sék — egy megfelelően komplexsége tett  $\mathcal{CN}$  tér egy elemét szolgáltatja.  $\mathcal{CN}$ -nek nem mindegyik eleme definiál olyan fényszerű geodetikus vonalat, mely valóban metszi  $\mathcal{CS}$ -et. Azok az elemek, amelyek metszik,  $\mathcal{CN}(\mathcal{S})$  elemeivel azonosíthatók és ha végrehajtjuk ezt az azonosítást, azt kapnánk, hogy

$$\mathcal{CN}(\mathcal{S}) \subset \mathcal{CN} \quad (5.20)$$

(ámbár logikai okokból ez az azonosítás a  $\mathcal{CN}(\mathcal{S}) \rightarrow \mathcal{CN}$  injektív leképezéssel helyettesíthető).

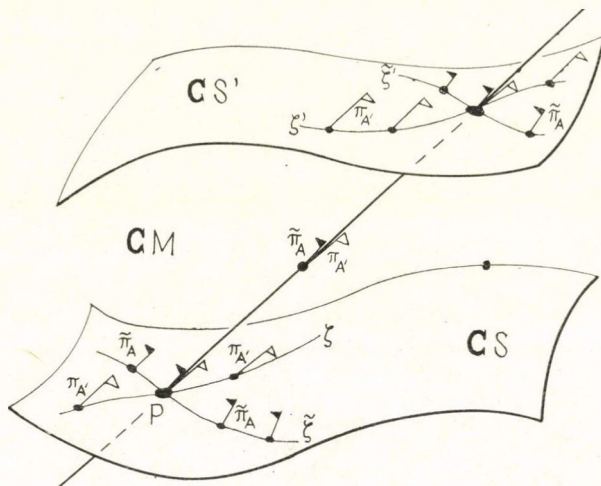
Most tegyük fel, hogy van két  $\mathcal{M}$ -hez tartozó Cauchy-féle analitikus hiperfelületünk,  $\mathcal{S}$  és  $\mathcal{S}'$ . Ekkor

$$\mathcal{N} \subset \mathcal{CN}(\mathcal{S}, \mathcal{S}') \subset \mathcal{CN}, \quad (5.21)$$

amelyben (alkalmazva az (5.20) azonosítást)

$$\mathcal{CN}(\mathcal{S}, \mathcal{S}') = \mathcal{CN}(\mathcal{S}) \cap \mathcal{CN}(\mathcal{S}'). \quad (5.22)$$

Mivel a  $\mathcal{CN}(\mathcal{S}, \mathcal{S}')$  komplex teret mind  $\mathcal{T}^*(\mathcal{S}) \times \mathcal{T}(\mathcal{S})$ , mind  $\mathcal{T}^*(\mathcal{S}') \times \mathcal{T}(\mathcal{S}')$  alterének tekinthetjük, ezért azonos módon leírható  $(W_\bullet, Z^\bullet)$  hiperfelületi twistorpárok-kal, midőn  $W_\bullet \in \mathcal{T}^*(\mathcal{S})$  és  $Z^\bullet \in \mathcal{T}(\mathcal{S})$ , vagy pedig az  $(U_\bullet, X^\bullet)$  twistorpárokkal, midőn  $U_\bullet \in \mathcal{T}^*(\mathcal{S}')$  és  $X^\bullet \in \mathcal{T}(\mathcal{S})$ . Ez egyáltalában nem jelenti azt, hogy  $W_\bullet$  bármi módon is azo-



8. ábra

nosítható  $U_\bullet$ -tal, vagy  $Z^\bullet$  az  $X^\bullet$ -tal (kivéve azt az esetet, mikor  $\mathcal{M}$  konformisan sík). A valóság az, hogy a  $(W_\bullet, Z^\bullet)$  pár az  $(U_\bullet, X^\bullet)$  párrá átindexelhető. (Ha  $W_\bullet$ -ot változtatjuk, de  $Z^\bullet$  rögzített, akkor például  $U_\bullet$  és  $X^\bullet$  is változni fog általában.)

Tisztában kell lennünk (legalábbis elvben) azzal, hogy az (5.18)-ban látható  $F$  függvényt hogyan kell értelmeznünk — a (3.39)-ben szereplő kontúrintegrálban — akkor, ha a szóban forgó téridő-pont nem fekszik  $\mathcal{CS}$ -en. Egyszerűen úgy fogjuk fel most  $F$ -et, mint  $U_\bullet$  és  $X^\bullet$  függvényét és az  $\mathcal{S}'$  (vagy  $\mathcal{CS}'$ ) hiperfelületet úgy választjuk meg, hogy átmenjen ezen a ponton. És valóban így is van: feltehetjük, hogy  $F \mathcal{CN}$ -en



van definiálva és ekkor teljes mértékben nélkülözni tudjuk a hiperfelületi twistorokkal való leírást! Úgy tűnik azonban, hogy — ha ezt a lehetőséget választjuk — esetleg egy értékes bepillantástól fosztjuk meg magunkat. (Itt fel kell hívnunk a figyelmet arra, hogy az  $FC\mathcal{N}$ -en felvett értékei valójában nem elégségesek (5.18)  $F$  függvényének definiálására, mert ez azt is előírja, hogy a  $(W_*, Z^*)$  párokra vonatkozólag  $Z^* W_* \neq 0$  legyen.)

Mivel  $\mathcal{M}$  analitikus, az  $\mathcal{N}$  invariáns szerkezetéhez tartozó  $\underline{\Phi}$  és  $\underline{\omega}$  kifejezések „komplexszé tehetők” és így  $C\mathcal{N}$ -be sorolhatók. Célszerű  $\underline{\Phi}$  konjugált komplexét  $-\underline{\bar{\Phi}}$ -t  $-\underline{\Phi}$ -től függetlennek tekinteni, bár  $\mathcal{N}$ -en  $\underline{\bar{\Phi}} = \underline{\Phi}$ . Ez egy másik,  $C\mathcal{N}$ -en definiált  $\underline{\bar{\Phi}}$  (komplexszé tett  $\underline{\Phi}$ ) egyalakot szolgáltat, ami  $C\mathcal{N}$ -en ugyanazokat az értékeket veszi fel, mint  $\underline{\Phi}$ , de függvényalakja más. Ezek az alakok vonatkozhatnak akár  $\mathcal{S}$ -re, akár  $\mathcal{S}'$ -re és felírhatjuk, hogy

$$\begin{aligned}\underline{\omega} &= idZ^* \wedge dW_* = idX^* \wedge dU, \\ \underline{\Phi} &= iZ^* dW_* = iX^* dU, \\ \underline{\bar{\Phi}} &= -iW_* dZ^* = -iU_* dX^*,\end{aligned}\tag{5.23}$$

de e szimbólumok jelentésének részletes magyarázatára még ki kell térnünk. (5.23) első összefüggése azt a gondolatot ébreszti, hogy a  $(W_*, Z^*)$  leírásról az  $(U_*, X^*)$  leírásra való áttérést *kanonikus* transzformációnak kell felfogni. De hogy ez szigorúan véve igaz legyen, szükségünk volna arra, hogy  $C\mathcal{N}$ -et a

$$(W_*, Z^*) \equiv (\varrho^{-1}W_*, \varrho Z^*); \quad (U_*, X^*) \equiv (\sigma^{-1}U_*, \sigma X^*)\tag{5.24}$$

ekvivalencia-relációk segítségével faktorizáljuk, ami egy hat-komplex-dimenziós teret (az  $\mathcal{N}$ -ben levő skálázott geodetikus fényvonalak komplexszé tett terét; lásd (5.12)-t, midőn  $\varrho = e^{i\theta}$ ) szolgáltat, amelyen  $\underline{\omega}$  most egy (komplex) szimplektikus szerkezetet definiáló nem-elfajult zárt kétalak. A hamiltoni módszer és generáló függvények mechanizmusa mindenesetre rendelkezésre áll és bizonyára lehetővé teszi a bepillantást a különböző hiperfelületeken definiált hiperfelületi twistorok között érvényes transzformációk természetébe. Nevezetesen: kimutatható, hogy, ha veszünk egy (1, 1) homogenitási fokú  $g(W_*, X^*)$  generáló függvényt, akkor a

$$Z^* = \partial g / \partial W_*, \quad U_* = \partial g / \partial X^*\tag{5.25}$$

egyenletek — (legalább is) formálisan — (5.23) első relációján kívül a második és harmadik relációt is kielégítik.

A hiperfelületi twistor fogalmának szembeszökő hátránya, hogy függ egy tetszőleges  $\mathcal{S}$  hiperfelület elhelyezkedésétől. Másik hibája, legalább is pillanatnyilag, hogy a  $Z^* W_*$  skalárszorzat fogalma nem általános. Aszimptotikusan sík téridő esetében mindkét nehézség leküzdhető, ha  $\mathcal{S}$ -et úgy határozzuk meg, hogy megengedjük viszhátrahúzóását a távoli (fényszerű) múltba vagy jövőbe [4, 7, 28], hogy ott az  $\mathcal{S}^-$  vagy  $\mathcal{S}^+$  fényszerű konformis végtelenek egyikébe menjen át. Hogy ezt elérjük, nem kell határértéket képeznünk, mert a konstrukció  $\mathcal{S}^\pm$ -ra közvetlenül alkalmazható. Azt azonban igazolni kell, hogy a metrika konformis skálázásakor a konstrukció invariáns marad, hiszen az ilyen újráskálázás elsősorban azért történik, hogy  $\mathcal{S}^\pm$ -t véges hiperfelületként kezelhessük. Tulajdonképpen csak azt kell észrevennünk, hogy (5.14)–(2.17) alapján — érvényes marad, ha (2.16) hat rá, és  $\hat{\pi}_{A'} = \pi_{A'}$ , ami (2.19)-



ből következik abban az esetben, ha  $\omega^A = 0$ . A hiperfelületi twistorok egész elmélete így függetlenné válik a konformis skálázástól.

A hiperfelületi twistorok tárgyalása folyamán többször említettük, hogy a konstrukció akkor a leghatékonyabb, ha  $S$  térszerű Cauchy-féle hiperfelület. Fényszerű hiperfelületek használata általában nehézségekre vezet, noha a konstrukció lokálisan a fényszerű esetben is alkalmazható. De a speciális fényszerű hiperfelületeknek van néhány igen egyszerű tulajdonsága és ezért okkal mondhatjuk, hogy ebben az esetben a konstrukció jobban működik, mint egy általános térszerű hiperfelület választásakor. És bár  $\mathcal{I}^\pm \mathcal{M}$ -re vonatkozólag szigorúan véve nem Cauchy-féle hiperfelületek, mégis (aszimptotikusan egyszerű  $\mathcal{M}$ -ben) ugyanazt a lényeges célt szolgálják: metszik  $\mathcal{M}$ -ben az összes geodetikus fényvonalat.

Ha részletesen tárgyalni akarjuk a  $\mathcal{T}(\mathcal{I}^-)$  és  $\mathcal{T}^*(\mathcal{I}^+)$  tereket, akkor először valamilyen képet kell alkotnunk a  $C\mathcal{I}^+$  szerkezetről. (Az  $\mathcal{I}^-$ -ra vonatkozó tárgyalás hasonló volna — a retardált terek esetében azonban sokkal egyszerűbb, mert az  $\mathcal{I}^\pm$ -t metsző gravitációs sugárzás okozza az összes nehézséget.) Jelen esetben bármelyik fényszerű hiperfelületre húzott  $n^a$  normális alakja

$$n^{AA'} = \iota^A \bar{\iota}^{A'}. \quad (5.26)$$

Ennek alapján a komplex érintő-vektorok az alábbi két komplex fényvektor lineáris kombinációi lesznek:

$$\iota^A \lambda^{A'}, \mu^A \bar{\iota}^{A'}. \quad (5.27)$$

$C\mathcal{I}^+$  esetében (5.27) mindkét típusa érintője egy teljesen fényszerű komplex síknak, és e sík többi érintője ugyanilyen alakú (speciális esetként ideértve (5.26)-ot is). Ez a tulajdonság ténylegesen annak a következménye, hogy  $\mathcal{I}^+$  generátorainak ((5.26) integrálgörbéinek) nyírása eltűnik — de erre itt nem térünk ki.

Általában az a gyakorlat, hogy  $\mathcal{I}^+$  koordinátáit és konform skáláját úgy választják meg, hogy belső metrikája a következő alakú:

$$ds^2 = -\frac{4d\eta d\bar{\eta}}{1 + \eta\bar{\eta}} + 0 \cdot du^2 \quad (5.28)$$

ahol az  $\eta$  komplex koordináta és az ismert gömbi polárkoordináták közötti kapcsolatot az  $\eta = e^{i\phi} \cotg \frac{1}{2} \theta$  összefüggés fejezi ki,  $u$  pedig egy (mondjuk) Bondi-típusú, retardált idő [44, 45, 4]. Az  $\eta$  komplex koordináta az egész Riemann-gömböt kitölti (ideértve az  $\eta = \infty$  esetet is), így  $\mathcal{I}^+$ -hoz az  $S^2 \times \mathbf{R}$  topológiát rendeli. Ha  $\mathcal{I}^+$ -t komplexszé akarjuk tenni, akkor lehetővé kell tennünk, hogy  $\bar{\eta}$  „megszabaduljon”  $\eta$ -tól és  $u$ -tól, s így komplex paraméter legyen belőle. Ekkor  $\bar{\eta}$  helyett  $\bar{\eta}$ -t írunk. A koordináta-változók teljes tartománya egy  $S^2 \times S^2 \times \mathbf{R}$  topológiájú teret adna. A fentebb említett teljesen fényszerű síkokat most az  $\eta = \text{konst.}$ , illetve  $\bar{\eta} = \text{konst.}$  egyenletek adják, úgy, hogy — ha csak a koordináták terét tekintjük — minden ilyen sík topológiája  $S^2 \times \mathbf{R}$  volna. Általában azonban csak arra lehet számítani, hogy  $C\mathcal{I}^+$  e koordinátatartománynak csak egy nyitott alkalmazását fedi le, amely tartalmazza az  $\mathcal{I}^+$  által adott  $S^2 \times \mathbf{R}$  „diagonált” (lásd a 9. ábrát).  $C\mathcal{I}^+$  topológiája — még akkor is, ha  $\mathcal{M}$  valójában egy  $\mathbf{M}$  Minkowski-tér — nem pontosan  $S^2 \times S^2 \times \mathbf{R}^2$ , hanem az  $S^2 \times S^2$ -re kiterjedő (csavart)  $\mathbf{R}^2$  köteg. (Ez azért van így, mert a komplexszé tett  $u$  nem megfelelő koor-



dinát az egész  $C\mathcal{I}^+$ -ben.) Az  $\eta = \text{konst.}$  és az  $\tilde{\eta} = \text{konst.}$  teljesen fényszerű síkok topológiai szintén csavart síkok.

Most nézzük meg, hogy a hiperfelületi twistor konstrukciót hogyan lehet alkalmazni  $C\mathcal{I}^+$ -ra. Az (5.14) egyenlet ((5.26) felhasználásával) most a következő alakú lesz:

$$l^A \pi^{A'} \nabla_{AA'} \pi_B = 0 \quad (5.29)$$

feltéve, hogy  $\pi_B$  nem arányos  $\tilde{l}_B$ -vel. Mindig található olyan  $l^A$  és egy új konformis skála úgy, hogy

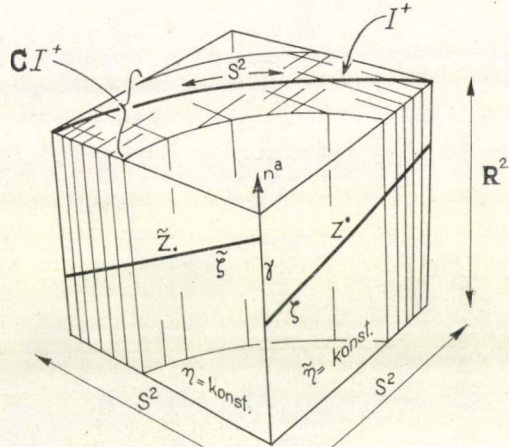
$$\nabla_{AA'} l_B = 0 \quad (5.30)$$

legyen. Ha ezt egybevetjük (5.29)-cel, észrevevesszük, hogy  $\zeta$  görbék ekkor *geodetikus fényvonalak*  $C\mathcal{I}^+$ -on. (Emlékeztetünk arra, hogy a skálázatlan geodetikus fényvonal fogalma konformisan valóban invariáns.) Ezek a geodetikus fényvonalak teljesen benne fekszenek az  $\tilde{\eta} = \text{konst.}$  síkokban. Ugyanúgy az (5.16) egyenlet alakja

$$\tilde{\pi}^A \tilde{l}^{A'} \nabla_{AA'} \tilde{\pi}_B = 0 \quad (5.31)$$

lesz, amiből látható, hogy a  $\tilde{\eta}$  görbék olyan geodetikus vonalak, amelyek az  $\eta = \text{konst.}$  síkokban fekszenek. Az *aszimptotikus twistor* tehát egy olyan  $Z^* \in \mathcal{T}(\mathcal{I}^+)$  elem, amely egy, a  $C\mathcal{I}^+$ -ban fekvő  $\zeta$  geodetikus fényvonalnak felel meg, az utóbbi érintő vektora  $l^A \pi^{A'}$  és  $\pi_{A'} \zeta$ -val párhuzamosan terjed ( $\zeta$  valamelyik  $\tilde{\eta} = \text{konst.}$  síkban fekszik); a  $\tilde{Z}_* \in \mathcal{T}^*(\mathcal{I}^+)$  elem egy olyan  $C\mathcal{I}^+$ -ban fekvő geodetikus fényvonalnak felel meg, amelynek érintő vektora  $\tilde{\pi}^A \tilde{l}^{A'}$  és  $\tilde{\pi}_{A'} \tilde{\zeta}$ -vel párhuzamosan terjed ( $\tilde{\zeta}$  valamelyik  $\eta = \text{konst.}$  síkban fekszik). Itt feltettük, hogy  $\pi_{A'} \tilde{l}^{A'} \neq 0 \neq l^A \tilde{\pi}_A$ . A  $\mathcal{T}(\mathcal{I}^+)$ -nak és a  $\mathcal{T}^*(\mathcal{I}^+)$ -nak is vannak olyan elemei, amelyek az  $l^A \tilde{l}^{A'}$  irányoknak felelnek meg, de ezek definíciója bonyolultabb, így ezeket itt nem tárgyaljuk. ( $\mathcal{T}(\mathcal{I}^+)$  és  $\mathcal{T}^*(\mathcal{I}^+)$  természetének mind ezen, mind egyéb tulajdonságait a [19] irodalmi hivatkozás taglalja.) Ezek a speciális, „teljesen  $\mathcal{I}^+$ -on fekvő” a szimptotikus twistorok azokkal a síktér-twistorokkal analógok, amelyek szabványos felírása  $(\omega^A, 0)$  vagy  $(0, \tilde{\omega}^{A'})$ , vagyis alakjuk  $I^{\alpha\beta} K_\beta$  vagy  $I_{\alpha\beta} L^\beta$ .

Most nézzük meg, hogy hogyan lehet formába önteni egy  $Z^* \in \mathcal{T}(\mathcal{I}^+)$  elem és egy  $Z_* \in \mathcal{T}^*(\mathcal{I}^+)$  elem  $Z^* \cdot Z_*$  skalárszorzatát. A 6.9 ábrán látható kedvezőtlen esetben a  $\zeta$ -t tartalmazó  $\tilde{\eta} = \text{konst.}$  síknak a  $\tilde{\zeta}$ -t tartalmazó  $\eta = \text{konst.}$  síkkal való  $\gamma$  metszése a  $CI^+$  tartományán kívül van. Az ilyen esetekben  $Z^* \cdot Z_*$  skalárszorzatról azt mondjuk, hogy szinguláris lett (kivéve azt az esetet, mikor található egy másik definíció, amellyel a reguláris tartományokban érvényes definíció analitikusan kiterjeszthető). De, tegyük fel, hogy kedvező esettel állunk szemben és  $\gamma$  nemcsak metszi  $C\mathcal{I}^+$ -t, de úgy



9. ábra



metszi, hogy a  $\zeta \cup \gamma \cup \tilde{\zeta}$ -ban létezik egy olyan folytonos  $\alpha$  pálya, mely összeköti a  $\zeta$ -ban levő  $Q$  pontot a  $\tilde{\zeta}$ -ban levő  $\tilde{Q}$  ponttal. (Jó volna feltenni azt is, hogy a homotópiától eltekintve egy és csak egy ilyen pálya van, mert ez egyértelművé tenné a definíciót.) Ezután a skalárszorzatot úgy kapjuk meg, hogy a  $Q$  pontban  $(0, \pi_A)$  segítségével  $Z^*$ -ot lokális twistorként adjuk meg, majd ezt a twistor-transzporttal  $\alpha$  mentén átvisszük a  $\tilde{Q}$  pontba. Az itt keletkező lokális twistornak a szokásos módon képezhető skalárszorzata, mégpedig a  $\tilde{Z}, \tilde{Q}$  pontban felvett  $(\tilde{\pi}_A, 0)$  lokális twistor leírásával. A lokális twistor-transzport tulajdonságai biztosítják (lásd (5.3) és (5.6)), hogy a definíció független  $Q$  és  $\tilde{Q}$  pontos helyétől — ezek helyett választhatnánk  $\gamma$ -nak  $\zeta$ -val, illetőleg  $\tilde{\zeta}$ -val való metszéspontjait is — és azt is, hogy ugyanarra az eredményre jutunk, ha az előző haladási iránnyal ellentétesen  $\tilde{Q}$ -ból haladunk  $Q$  felé.

Most már rendelkezésünkre áll  $Z \cdot \tilde{Z}$ , mint a  $\mathcal{T}(\mathcal{I}^+) \times \mathcal{T}^*(\mathcal{I}^+)$  egy nyílt alhalmaza fekvő holomorf függvény. Ez a nyílt alhalmaz tartalmazza  $\mathcal{CN}(\mathcal{I}^+)$ -t, ahol a  $Z \cdot \tilde{Z} = 0$  definíció jelentése ugyanaz, mint (5.17)-ben. Mivel így  $Z \cdot \tilde{Z}$  most már a  $\mathcal{CN}(\mathcal{I}^+)$  környezetében definiálva van, képezhetjük (külön-külön) a  $Z$  és a  $\tilde{Z}$  szerinti deriváltakat. Ezekkel felírhatók (5.23) differenciál kifejezése és a benne alkalmazott szimbólumokat is pontosabban tudjuk értelmezni. (Vehettük volna például  $W, \varepsilon T^*(I^+)$ ,  $Z \cdot \varepsilon \mathcal{T}(\mathcal{I}^+)$ ,  $U, \varepsilon \mathcal{T}^*(\mathcal{I}^-)$ ,  $X \cdot \varepsilon \mathcal{T}(\mathcal{I}^-)$ -t.) Ha  $Z \cdot \tilde{Z}$ -ot és a  $Z$  és  $\tilde{Z}$  változó k szerint külön-külön egyszer deriváljuk, majd a  $\tilde{Z} = \bar{Z}$  helyettesítést alkalmazzuk, akkor olyan mennyiséget kapunk, amely  $\mathcal{T}(\mathcal{I}^+)$  számára egy  $(++--)$  előjelezésű hermitikus metrikus tenzort definiál —  $\mathcal{T}(\mathcal{I}^+)$ -nak legalábbis azokban a pontjaiban, amelyek  $\mathcal{N}(\mathcal{I}^+)$ -hoz elég közel fekszenek és így  $Z \cdot \tilde{Z}$  egyértelműen definiált —  $\mathcal{T}(\mathcal{I}^+)$  ezen részének pedig Kähler-sokaság [43] szerkezetet ad. Az (5.23)-ban szereplő  $\underline{\omega} = idZ \wedge d\bar{Z}$ , a Kähler-féle kétalak.

A Kähler-szerkezet sajátságairól sok mindent lehetne mondani; például azt, hogy a Kähler-féle görbület kapcsolatba hozható a gravitációs sugárzással [19]. Ezeket illetően itt nincs szándékomban részletekbe bocsátkozni. Legfontosabb eredményünk annak felismerése, hogy  $\mathcal{T}(\mathcal{I}^+)$  gazdag szerkezetének elemei kapcsolatba hozhatók a téridő fizikai tartalommal rendelkező aszimptotikus tulajdonságaival. Ez a szerkezet valószínűleg megfelelő lesz arra, hogy a twistor-szóráselmélethez szükséges matematikai alapműveleteket definiálni tudjuk, de ahhoz, hogy ezt a szerkezetet egy igazán jó módszerrel kezelni tudjuk, még sokat kell tanulni. Arra is fel szeretném hívni a figyelmet, hogy kimenő gravitációs sugárzás jelenlétében a  $\mathcal{T}(\mathcal{I}^+)$  aszimptotikus twistor-tér görbült, így szerkezete lényegesen különbözik a T szabványos twistor-tér szerkezetétől. Ha a téridő stacionárius,  $\mathcal{T}(\mathcal{I}^+)$ -nak és T-nek izomorf szerkezete van. (Ehhez elég, ha nincs kimenő sugárzás.)

Röviden ki kell még térnünk a  $\mathcal{T}(\mathcal{I})$ ,  $\mathcal{CN}$  és  $\mathcal{T}(\mathcal{I}^+)$  komplex sokaságok globális tulajdonságaira. Figyelemreméltó tény, hogy a komplex sokaságok globális szerkezetükben néha egy csomó információt tudnak „tárolni”, még akkor is, ha lokálisan a sokaság dimenziója az egyetlen invariáns mennyiség. És valóban az a helyzet, hogy  $\mathcal{T}(\mathcal{I})$  globális komplex szerkezete, általános esetben — elég is ahhoz, hogy  $\mathcal{CM}$  konform geometriájának egy része  $\mathcal{CS}$  pontjaiban rekonstruálható legyen. Sőt,  $\mathcal{CN}$  globális komplex szerkezetéből általában  $\mathcal{CM}$  konform geometriája is rekonstruálható. Ehhez azonban szükséges, hogy  $\mathcal{CN}$  valóban a  $\mathcal{CM}$ -ben levő komplex geodetikus fényvonalak teréhez tartozzék és ne egyszerűen a (lokálisan) komplexsá tett  $\mathcal{N}$  tér legyen. Így mód nyílik arra, hogy  $\mathcal{CN}$  bizonyos irányokban szert tegyen a szükséges kompaktsági fokra.  $\mathcal{T}(\mathcal{I}^+)$  globális komplex szerkezete valószínűleg információt jordoz a kimenő gravitációs sugárzás terére vonatkozólag. A globális komplex szerkezet



mindegyik esetben különbözik attól a szerkezettől, amelyet úgy kapunk, hogy a Minkowski-térből a megfelelő konstrukciókkal előállítjuk a komplex terek egy nyílt alhalmazát.

Fentieket úgy fogjuk megvilágítani, hogy megvizsgálunk kompakt holomorf függvényeket  $\mathbf{PT}$ -ben,  $\mathbf{PT}(\mathcal{S})$ -ben és  $\mathbf{PT}(\mathcal{S}^+)$ -ban.  $\mathbf{PT}$  esetében ezen görbék egy speciális 4 paraméteres komplex végtelenjével van dolgunk, a  $\mathbf{PT}$ -ben levő projektív vonalakkal, amelyek  $\mathbf{CM}$  pontjait reprezentálják (lásd a 2. §-t).  $\mathbf{PT}(\mathcal{S})$  esetében ez a görbecsalád módosul, egy 3 paraméteres alrendszer keletkezik ekkor, amely csak  $\mathbf{CS}$  pontjait ábrázolja.  $\mathbf{CM}$  többi pontja általános esetben nem reprezentálható kompakt holomorf görbékkel. Ami  $\mathbf{PT}(\mathcal{S}^+)$ -t illeti — úgy tűnik —, ismét egy 4 paraméteres komplex görbecsaládot kapunk (amelynek homológiaosztálya ugyanaz, mint előbb és fel tesszük, hogy a kimenő gravitációs sugárzás tere nem túlságosan „egyenetlen”). De ezek a görbék most általában *nem*  $\mathbf{CM}$  valódi pontjainak felelnek meg, hanem egy új  $\mathcal{H}$  tér pontjait definiálják [46] (az angol „heaven” szó után, ami magyarul „mennyekeket” jelent) amit úgy foghatunk fel, mint  $\mathbf{CS}^+$  komplex szeleteinek a terét, amelyre vonatkozólag egy bizonyos nyírási paraméter eltűnik. Ez az értelmezés akkor jön előtérbe, mikor a korábban már említett általánosított Kerr-tételt (lásd (5.15)-öt) az  $\mathcal{S} = \mathcal{S}^+$  esetre alkalmazzuk. (A tételnek ez az alakja *E. T. Newman*-tól és munkatársaitól [47] származik.)

*Newman* azt is megmutatta, hogy  $\mathcal{H}$ -nak igen egyszerű módon komplex Riemann-szerkezet adható.  $\mathcal{H}$  geometriája jelenleg még vizsgálat tárgya.\* A  $\mathcal{H}$  tér érdekes tulajdonsága, hogy komplex konform görbülete (3.8) alakjában felírva

$$C_{AA'BB'CC'DD'} = \psi_{ABCD} \varepsilon_{A'B'} \varepsilon_{C'D'} + \varepsilon_{AB} \varepsilon_{CD} \tilde{\psi}_{A'B'C'D'} \quad (5.32)$$

kielégíti a  $\psi_{ABCD} = 0$  egyenletet, bár általában  $\tilde{\psi}_{A'B'C'D'} \neq 0$ . Ez csak azért lehetséges, mert  $\mathcal{H}$  komplex Riemann-tér.

## 6. További kilátások

Az előző pontokban megpróbáltam a twistorelmélet lényegét jelen állapotában vázolni és említést tettem néhány részletkérdésről is. Néhány dolgot elhagytam. Ezek között a legfontosabbak: a twistorok hamiltoni szóráselmélete (amelyhez jelentős új eredményekkel járult *J. Moore*, *Z. Perjés* és *P. Tod*), több twistor-diagram explicit kiszámítása (különösen *G. Sparling* néhány új munkája) és a tömeggel bíró terekre vonatkozó néhány eredmény (*A. Hodges*-tól). A twistorelmélet továbbra is erősen fejlődő tudományág. Nyilvánvaló azonban, hogy több területen új meglátásokra van szükség. Nagyon kellene egy jól definiált szabály a twistor-diagramok generálására és ugyancsak egy megfelelő szabály a kontúr-topológiára vonatkozólag is. Nagyon valószínű, hogy a szóráselmélet perturbációs közelítése ebben a tekintetben nem megfelelő és valójában egy egyszerű „diagram” kellene, ami az egész eljárást generálná. Ezek a gondolatok jelen pillanatban nagyon is spekulatív jellegűek, noha bizonyos becsléseket megalapozottnak tartok. További meglátások szükségesek abban a tekintetben, hogyan lehetne a legegyszerűbb módon megszüntetni a konform invarianciát a twistorelméletben. Az elektromágneses és gravitációs terek sajátos kezelését illetően

\* Most válik világossá, hogy  $\mathcal{H}$  kielégíti az Einstein-féle vákuum-egyenleteket is!



is még sok minden hiányzik; sok, e tárgykört érintő új elgondolás még befejezetlen állapotban van.

A gravitáció esetében szeretnénk valamilyen módon twistor holomorf függvényekkel előállítani a görbült téridőket,\* mivel nagyon kíváncsiak volnánk egy egyszerű kifejezési módot találni arra, hogy az Einstein-féle egyenletek teljesüljenek. Bizonyos jelek arra mutatnak, hogy ez a program megvalósítható. Valóban meg lehet adni téridő-pontokat a görbült, aszimptotikusan sík (analitikus) téridőben az aszimptotikus twistortérben fekvő holomorf függvényekkel\*. Ezen a módon a téridő-sokaságokra vonatkozó lokális meggondolások átírhatók holomorf függvényekre vonatkozó megállapításokra. Gondolatébresztő analógiák találhatók a görbült téridők tanulmányozására kidolgozott twistorközelítés és a geometriai kvantálás Souriau—Konstant-féle elmélete között [48, 49]. Ez erősíti azt a hitemet [32, 5], hogy a twistorok felfedik majd a klasszikus általános relativitáselmélet és a kvantummechanika közötti rejtett kapcsolatot.

A természetnek végül is úgy tetszett, hogy a világmindenséget ebből a két összetevőből szője — és még néhányból, amelyeket mind ez ideig nem ismerünk. Kell, hogy legyenek még olyan összefüggések, amelyeket ez idő szerint nem vagyunk képesek felismerni. És látásunkat nemcsak a tudás hiánya teszi homályossá; a tér, az idő, a kvantummechanika előítéletekkel teli fogalmai részben ugyancsak hibáztathatók.

### Köszönetnyilvánítások

Hálámat fejezem ki azoknak a kollégáknak és hallgatónak, akik segítettek a közölt elgondolások összegyűjtésében; közülük néhányat a szövegben már név szerint említettem. De vannak mások is; értékes javaslatokat kaptam *L. P. Hugston*-tól és különösen *C. J. Isham*-tól. Köszönet illeti továbbá *B. D. Bramson*-t a kéziratral kapcsolatos sok kritikai megjegyzéséért. *Judith Daniels*-nek is le vagyok kötelezve, aki a kézirat egy részében javításokat indítványozott és — ami még fontosabb volt — megengedte, hogy elmondjam neki gondolataimat, mikor azok még nem öltöttek végleges alakot. Így sok gondolat az ő segítségével öltött formát.

### IRODALOM

1. *C. F. Weiszacker*: Brit. J. Phil. Sci. (1973) 321; úgyszintén Quantum Theory and Beyond (Ed. Ted. Bastin; Cambridge Univ. Press. 1971) kötetben.
2. *R. Penrose*: Quantum Theory and Beyond (Ed. Ted. Bastin; Cambridge Univ. Press. 1971) kötetben.
3. *E. Cartan*: Ann. Sci. Ecole Normale Supérieure 31 (1914) 263.
4. *R. Penrose*: Group Theory in Non-Linear Problems (Ed. A. O. Barut, D. Reidel 1974) kötetben.
5. *R. Penrose*: Magic Without Magic, John Archibald Wheeler (ed. J. R. Klauder, W. H. Freeman & Co., San Francisco 1972) kötetben.
6. *B. D. Bramson*: Physics Letters 47A (1974) 431.
7. *R. Penrose*: Battelle Rencontres 1967 (Eds. C. M. DeWitt & J. A. Wheeler; Benjamin, New York 1968) kötetben.
8. *J. Ehlers & A. Schild*: Comm. Math. Phys. 32 (1973) 119.
9. *H. Bateman*: Mathematical Analysis of Electrical and Optical Wave Motions (Camb. Univ. Press 1915).

\*  $f$  legyen holomorf és +2 homogenitási fokú a  $\mathcal{T}(\mathcal{I}^+)$  egy alkalmasan választott részén. Ekkor a  $(Z^*, W_*) \in \mathcal{T}(\mathcal{I}^+) \times \mathcal{T}^*(\mathcal{I}^+)$  párok — amelyekre az  $f(Z^*)=0$  és a  $W_* = \partial f / \partial Z^*$  feltételek egyidejűleg teljesülnek —  $\text{PCN}$ -nek egy részhalmazát definiálják, amely a  $CM$  ben levő fényszerű hiperfelületek generátorait reprezentálja. A feladat abban áll, hogy ki kell választanunk az  $f$ -ek egy olyan rendszerét, amely számára ezek a hiperfelületek egy — az Einstein-egyenleteket kielégítő —  $\mathcal{M}$  téridő pontjainak fénykúpjai.



10. *I. Robinson & A. Trautman*: Proc. Roy. Soc. (Lond.) *A265* (1962) 463.
11. *I. Robinson*: J. Math. Phys. *2* (1961) 290.
12. *R. P. Kerr & A. Schild*: Proc. Symposia in Appl. Math. *17* (1965) 199.
13. *I. Robinson, J. R. Robinson & J. D. Zund*: J. Math. Mech. *18* (1969) 881.
14. *E. T. Newman & A. I. Janis*: J. Math. Phys. *6* (1965) 915.
15. *E. T. Newman*: J. Math. Phys. *14* (1973) 102, 774.
16. *L. Landau*: Niels Bohr and the Development of Physics, Pergamon, Lond., 1955.
17. *B. S. DeWitt*: Phys. Rev. Lett. *13*, (1964) 114.
18. *A. Salam & J. Strathdee*: Nuovo Cim. Lett. *4* (1970) 101.
19. *R. Penrose & M. A. H. MacCallum*: Physics Reports *6C* (1973) 242.
20. *R. Penrose*: J. Math. Phys. *8* (1967) 345.
21. *N. H. Kuiper*: Ann. Math. *50* (1949) 916.
22. *E. Grgin*: Ph. D. Thesis, Syracuse University (1966)
23. *J. Wess & B. Zumino*: Nuclear Phys. *B70* (1974) 39.
24. *J. G. Semple & L. Roth*: Algebraic Geometry (Clarendon Press Oxford 1949).
25. *P. A. M. Dirac*: Proc. Roy. Soc. (Lond.) *A155* (1936) 447.
26. *M. Fierz & W. Pauli*: Proc. Roy. Soc. (Lond.) *A173* (1939) 211.
27. *M. Fierz*: Helv. Phys. Acta *13* (1940) 45.
28. *R. Penrose*: Proc. Roy. Soc. (Lond.) *A284* (1965) 159.
29. *O. Laporte & G. E. Uhlenbeck*: Phys. Rev. *37* (1931) 1380.
30. *R. K. Sachs & P. Bergmann*: Phys. Rev. *112* (1958) 674.
31. *R. Penrose*: J. Math. Phys. *10* (1969) 38.
32. *R. Penrose*: Int. J. Theor. Phys. *1* (1968) 61.
33. *W. Rühl*: Group Theory in Non-Linear Problems (Ed. A. O. Barut; D. Reidel (1974)) kötetben.
34. *M. Sato*: J. Fac. Sci. Univ. Tokyo, Sect. I, *8* (1959/60) 139, 387.
35. *R. Penrose*: Quantization of generally covariant field theories (A. R. L. Tech. Doc. Rep. 63—56, P. G. Bergmann 1963) kötetben.
36. *E. T. Newman & R. Penrose*: Proc. Roy. Soc. (Lond.) *A305* (1968) 175.
37. *A. Hodges*: Preprint 1974.
38. *G. A. J. Sparling*: Ezen kötet 7. fejezete.
39. *G. A. J. Sparling*: Ph. D. Thesis, London University (1974).
40. *L. Gross*: J. Math. Phys. *5* (1963) 687.
41. *P. A. M. Dirac*: The Principles of Quantum Mechanics (Ox. Univ. Press, 1930).
42. *R. P. Geroch*: J. Math. Phys. *11* (1970) 437.
43. *E. Nelson*: Tensor Analysis (Princeton U. Press 1967).
44. *H. Bondi, A. W. K. Metzner & M. J. G. van der Burg*: Proc. Roy. Soc. (Lond.) *A269* (1962) 21.
45. *R. K. Sachs*: Proc. Roy. Soc. (Lond.) *A270* (1962) 103.
46. *E. T. Newman*: report to Tel Aviv conference 1974.
47. *B. Aronson, R. Lind, J. Messmer & E. T. Newman*: J. Math. Phys. *12* (1971) 2462.
48. *B. Konstant*: Lectures in modern analysis and applications, III. Springer Lecture Notes 170 (1970) gyűjteményben.
49. *J. M. Souriau*: Structures des systèmes dynamiques (Dunod, 1970).
50. *Z. Perjés*: Twistor Variables of Relativistic Mechanics (Preprint, Budapest, 1974).

Fordította: Csoma Zsigmond és Jeanplong Józsefné







Technikai szerkesztő: Turchányi György  
A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Marton Andor  
A kézirat beérkezett: 1978. II. 26 — Terjedelem: 9,1 (A/5) ív  
79-1897 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József







Ára: 12,— Ft  
Előfizetés kötetenként: 72,— Ft

INDEX: 26491 ISSN 0025—0104
--------------------------------

## TARTALOMJEGYZÉK

*Kugler Sándor*: A nematikus folyadékkristályok mikrodinamikájának vizsgálata ..... 309

### A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

*Roger Penrose*: A twistor-elmélet céljai és eredményei ..... 343



307.226

IV.

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

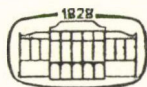
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR  
ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
PÁL LÉNÁRD

XXVII. KÖTET

5. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1979

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10-10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár

Biofizikai Intézet

1444 Budapest VIII. Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 72 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.

5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.

6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.

7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# A DISZLOKÁCIÓS TEREK HATÁSA A PONTHIBÁKON LOKALIZÁLT ELEKTRONOKRA ÉS REZGÉSEKRE\*

JANSZKY JÓZSEF

MTA Kristályfizikai Kutatólaboratórium, Budapest

Kandidátusi értekezés

## TARTALOMJEGYZÉK

Bevezetés .....	411
I. Általános rész .....	412
1. Célkitűzés .....	412
2. Irodalmi áttekintés .....	413
2.1. Töltött diszlokációk, ponthibák és diszlokációk kölcsönhatása .....	413
2.2. A momentumok módszere .....	418
2.3. A koherens állapotok .....	423
2.4. Gyorsan mozgó diszlokációk mechanikus tere, együttmozgó gyors diszlokációk kölcsönhatása .....	424
II. Saját vizsgálatok .....	426
3. A diszlokációs fotovezetési spektrum .....	426
3.1. A kísérleti metodika .....	426
3.2. A kísérleti eredmények értelmezése .....	429
3.3. A „geometriai effektus” hatása a diszlokációs fotovezetési spektrumra .....	431
3.4. A kísérleti eredményekből levont következtetések .....	434
3.5. A diszlokáció jog Coulomb-terének hatása az F-centrumra .....	438
3.6. A diszlokáció mechanikai terének hatása az F-centrumra .....	440
4. A diszlokáció dinamikus kölcsönhatása a ponthibákon lokalizált rezgésekkel .....	448
4.1. A diszlokáció jog Coulomb-terének kölcsönhatása a lokális rezgésekkel .....	448
4.2. A diszlokáció mechanikai terének kölcsönhatása a rezgésekkel .....	453
5. Az eredmények összefoglalása (tézisek) .....	457
6. Irodalom .....	459

## BEVEZETÉS

A 60-as évek első felében *Turchányi György* és *Tarján Imre* kezdeményezésére és vezetésével elkezdődtek a Budapesti Orvostudományi Egyetem Biofizikai Intézetében a diszlokációk és ponthibák kölcsönhatásának vizsgálatai. Itt került kifejtésre egy nemzetközi érdeklődést kiváltó új kísérleti módszer, a diszlokációs fotovezetés [194]. Amikor 1969-ben a Biofizikai Intézetben működő MTA Kristályfizikai Tanszéki Kutató Csoporthoz kerültem, azt a megbízatást kaptam, hogy kapcsolódjak be ezekbe a kutatásokba. Jelen értekezésemben az ebben a témában elért eredményeimet foglalom össze.

Az értekezés az MTA Kristályfizikai Kutatólaboratóriumában, ill. ennek jogelődjében, az MTA Kristályfizikai Tanszéki Kutató Csoportban készült. Ezúton szeretném megköszönni *Tarján Imre* akadémikusnak, a Biofizikai Intézet vezetőjének és *Voszka Rudolf*nak, a Kristályfizikai Kutatólaboratórium igazgatójának azt a támogatást, amit munkámban és a dolgozat megírásában kaptam.

Témavezetőm *Turchányi György* egyetemi tanár volt, akinek a téma kitűzésétől a kísérleti eljárás kidolgozásán keresztül a végső megfogalmazásig nyújtott sokoldalú segítségét külön szeretném megköszönni. Munkatársaim közül köszönettel tartozom mindazoknak, akikkel közös témában dolgoztam.

\* Kandidátusi értekezés 1977.



Név szerint szeretném kiemelni azokat, akikkel való együttműködés több közös cikket eredményezett, így ismételtén *Turchányi Györgyöt*, *Tarján Imrét*, *Mátrai Máriát*, a Biofizikai Intézet tanársegédjét, és *Ju. Ja. Jusint*, a moszkvai Krisztallográfiai Intézet munkatársát.

Szeretnék végül köszönetet mondani *Kovács Pálnének* és *Fabó Katalinnak* a kiértékelési munkában nyújtott segítségért, *Tóth Imrénének* a rajzok és *Stein Évának* a gépelés gondos elkészítéséért.

## I. ÁLTALÁNOS RÉSZ

### 1. Célkitűzés

Több évtizedes felismerés, hogy a kristályos anyagok mechanikai tulajdonságait a bennük levő diszlokációk viselkedése erősen befolyásolja [152]. A diszlokációk kölcsönhatásba léphetnek egymással és a kristályban levő egyéb rács hibákkal, így a ponthibákkal is. Jelen dolgozat az utóbb említett kölcsönhatásokkal foglalkozik. Ezek a kölcsönhatások egyrészt befolyásolják a ponthibák tulajdonságait, másrészt visszahatnak maguknak a diszlokációknak a viselkedésére is. Nem fémes kristályokban a diszlokációk gyakran rendelkeznek töltéssel, ami származhat hibahelytől, ill. szennyező atomtól (pl. ionkristályokban és egyes félvezetőkben) és lehet a diszlokáció vonal saját tulajdonsága is (pl. a poláros félvezetőkben). Ily módon a diszlokációk mechanikai feszültségterük mellett gyakran rendelkeznek elektromos térrel is.

*Az értekezés célja*, hogy vizsgálja a diszlokációk elektromos és mechanikai feszültségterének hatását a ponthibákra, mint elektroncentrumokra (II. 3. fejezet), ill. a ponthibákon lokalizált rezgésekre (II. 4. fejezet), de nem tárgyal egyéb, ponthibák és diszlokációk kölcsönhatásából eredő hatásokat, mint pl. a ponthibák migrációját a diszlokációk terében.

A diszlokáció terének az elektroncentrumra való hatását egy általunk kifejlesztett kísérleti módszer, a *diszlokációs fotovezetés* alapján tárgyalom. A módszer lényege abban áll, hogy a fotovezetést nem a kristályra helyezett külső elektromos tér segítségével hozzuk létre, hanem a kristály belsejében keltett lokális elektromos tér felhasználásával idézzük elő. Esetünkben az ionkristályok deformálásakor fellépő, a töltött diszlokációk elmozdulásából származó elektromos tér segítségével mértünk. A fotoelektronokat adó centrumokat alkali-halogenid kristályok színezésével állítottuk elő.

Kísérletünkben az elektromos és mechanikus tér egyidejűleg van jelen, és nem áll módunkban az egyes hatások nagyságának külön-külön való meghatározása. E célból elméleti számításokat végeztem a momentumok módszere segítségével (II. 3.5. és 6. pontok).

Ugyancsak elméletileg tárgyalom a ponthibákon lokalizált rezgések és a diszlokáció elektromos (II. 4.1. pont) és mechanikus terének kölcsönhatását (II. 4.2. pont); az utóbbi esetben különös tekintettel a diszlokációk kooperatív mozgásából eredő következményekre.

Az irodalmi áttekintést úgy igyekeztem összeállítani, hogy az általunk használt metodikák rövid összefoglalása mellett az értekezés anyagát érintő kérdésekben főleg a monográfiákban nem szereplő irodalomról adjak, az anyag túl nagy volta miatt sajnos távolról sem teljes képet. Nem tárgyaltam pl. a diszlokációk, valamint a diszlokációk és ponthibák kölcsönhatásának olyan kérdéseit, amelyek hazai szerzők által írt könyvben [147] hozzáférhetők.



## 2. Irodalmi áttekintés

### 2.1. Töltött diszlokációk; ponthibák és diszlokációk kölcsönhatása

A diszlokációk viselkedése sok szempontból meghatározója a kristály egyes tulajdonságainak. A szilárd test képlékeny alakváltozása csak a diszlokációk szerepének figyelembevételével érthető meg. A diszlokációk viselkedését viszont a ponthibákkal való kölcsönhatásuk erősen befolyásolja.

A diszlokációk és ponthibák kölcsönhatásának óriási irodalma van [146, 147, 162]. A diszlokációk és színcentrumok kölcsönhatásáról részletes áttekintés található Clark és Crowford munkájában [117].

A diszlokáció mechanikai terének hatását általában mint méreteffektust, ill. mint modulus effektust tárgyalják, vagyis figyelembe veszik azt a tényt, hogy a ponthibát alkotó atom egyrészt méreteiben különbözik az ép rácsot alkotó atomtól, másrészt a ponthiba közvetlen közelében megváltoznak a kristály rugalmassági állandói.

A töltött diszlokáció elektromos erőterének a ponthibákkal való kölcsönhatását általában mint egy elektrosztatikus térnek az elektromos töltéssel rendelkező kristályhibákkal való kölcsönhatását vizsgálják [163]. Stoneham vizsgálta a rezonancia vonalak kiszélesedését a töltött diszlokációk terében, de csak a kristály egészében vett átlag kiszélesedés szempontjából [119].

Értekezésemben fontos szerepet játszik a diszlokáció-töltés, ezért részletesebben áttekintem a vele kapcsolatos jelenségeket, a fejezet végén pedig áttekintem a diszlokációk kölcsönhatását a ponthibákon lokalizált rezgésekkel.

A töltött diszlokációk több fizikai jelenségben szerepet játszanak, ill. egyes kutatók feltételezése szerint szerepet játszhatnak:

1. A vezetőképesség megnövekedése a kristály plasztikus deformálásakor (Gyulai—Hartly-effektus).
2. Elektromos tér megjelenése a kristály plasztikus deformálásakor (Sztepanov-effektus).
3. Deformációs lumineszcencia.
4. Fotomechanikus jelenség.
5. Ferromágneses tulajdonságok megjelenése alkálihalogenid kristályokban.
6. A félvezető tulajdonságok átfordulása a töltött diszlokációk közvetlen környezetében.
7. Felületi töltések megjelenése az ionkristályok frissen hasított felületén. (A legutóbbi eredmények szerint valószínűbb az ionok egyenlőtlen eloszlásán alapuló magyarázat.)
8. Elektromos jel megjelenése a kristályon végigfutó lökéshullám során.

A továbbiakban az egyes jelenségeket a disszertáció témája szempontjából megítélt fontosságuk szerinti részletességgel fogjuk tárgyalni.

1. Gyulai—Hartly-effektus [1]. A legújabb irodalomban [2] 3 különböző jelenséget különböztetnek meg ezen a néven:

- a) A vezetőképesség a deformálás ideje alatt nagyságrendekkel megnő és ez az éles növekedés a terhelés megszűntével szinte azonnal eltűnik [3]. Jeszenszky és Kiss [4] megfigyelték, hogy a terhelés alatt a vezetőképesség gyorsan ingadozik.



A vezetőképesség-változás kimérését a Sztyepanov-effektus erősen zavarja. Mint az utóbbi szerzők kimutatták, természetes kősóban, szemben a növesztettel, szimmetrikus terhelés esetén a Sztyepanov-effektus nem jelenik meg, míg a vezetőképesség változás megfigyelhető. Ezt azért fontos kiemelni, mert egyes szerzők a vezetőképesség változást tagadva, mindent a Sztyepanov-effektussal próbáltak magyarázni. A jelenség legvalószínűbb magyarázata az, hogy az elektromos tér a töltött diszlokációk mozgását befolyásolja, felborítja az egyensúlyt a különböző irányban mozgó diszlokációk között és így a diszlokációk maguk a vezetőképesség növekedését okozó töltéshordozók.

- b) A vezetőképesség a terhelés megszűnte után még rövidebb-hosszabb ideig magasabb értéken marad. Ezt a jelenséget szokás „igazi” Gyulai—Hartly-effektusnak nevezni. A jelenséget Kiss József vizsgálta [5] nagy alaposággal. A terhelés hatására a vezetőképesség mintegy 10-szeresére nő és kb. 1 óra alatt csökken le az eredetihez közeli értékre. A jelenségre *Fishbach* és *Nowick* ajánlott elfogadható modellt [6, 7]. Szerintük a mozgó diszlokációk hatására a szennyező—hibahely-komplexek disszociálnak, és így keletkeznek új töltéshordozók.
- c) A valódi Gyulai—Hartly-effektus lecsengése után a vezetőképesség kisebb, mint amekkora a terhelés előtt volt [8—11]. Ezzel szemben  $\text{OH}^-$  és  $\text{O}_2^-$ -val [12], valamint  $\text{Ca}^{++}$ -mal [13] szennyezett kristályon megnövekedett maradvány-vezetőképességet találtak. A fenti effektusok általában nem jelennek meg 200—250 °C-nál magasabb hőmérsékleten. A jelenség magyarázata szerint a kristály valamilyen csapda folytán elszegényedik töltéshordozókban (a modellek többségében diszlokáció, *Fröhlich* és *tsai* szerint anion-kation hibahely párok mint precipitációs magok játsszák a csapda szerepét).

2. *Sztyepanov-effektus* [14, 15]. 1933-ban Sztyepanov kősó plasztikus deformálásakor elektromos potenciálkülönbséget tapasztalt az elektródjain. A Sztyepanov-effektust különböző módszerekkel vizsgálták:

- a) a friss diszlokációk keletkezése után az elmozduláskor megjelenő elektromos jel [14, 6, 16—27] vizsgálata,
- b) a megöregedett diszlokációk rezgő mozgása közben megjelenő elektromos jel [28—35] vizsgálata,
- c) fordított Sztyepanov-effektus vizsgálata: külső elektromos tér hatására mechanikai deformáció jött létre [36—46],
- d) kombinált módszer alkalmazása: a diszlokációra egyidejűleg hat külső elektromos és mechanikus feszültségtér [47—52].

Főbb eredmények:

- A) Csak az éldiszlokációk szállítanak töltést [38, 39, 53, 54].
- B) A Sztyepanov-effektus létrejöttéhez valamilyen mechanikai előjelű diszlokációnak fölöslegben kell lennie [6].
- C) A fordított Sztyepanov-effektus arról tanúskodik, hogy az éldiszlokációk eredetileg is töltöttek.
- D) A kristályra ható szinte bármilyen hatás befolyásolja a Sztyepanov-effektus nagyságát.



Le kell szögezni, hogy a nagyszámú publikáció ellenére a töltés természete még mindig nem teljesen tisztázott. Ennek okát a kísérleti eredmények értelmezésének nehézségeivel kell magyaráznunk: a próbadarab polarizációját ( $P$ , a kísérletben mért mennyiség) felírhatjuk

$$\vec{P} = q\lambda\vec{\xi} \quad (2.1.1)$$

alakban, ahol  $q$  a diszlokációk effektív lineáris töltéssűrűsége,  $\lambda$  az elmozdult éldiszlokációk effektív sűrűsége,  $\vec{\xi}$  a diszlokációk átlagos elmozdulása a töltésüket kompenzáló töltésekhez képest. Általános esetben mind a három ismeretlen mennyiség, vagyis az egyenlet határozatlan.

Ilyen értelemben az előzőekben említett  $a$ ) módszer a legproblematisabb,  $a$ )  $b$ ) módszer esetén a diszlokáció szám nem változik és így két ismeretlen marad csak. A (2.1.1.) egyenletben szereplő ismeretlen  $\xi$  és  $\lambda$  értéket fizikai megfontolásokon nyugvó becslések alapján kaphatjuk meg. Ezen becsléseket óvatosan kell kezelnünk, már csak azért is, mert általában nem veszik figyelembe azt a tényt, hogy a diszlokáció-források nemcsak a terhelt felületen vannak [53, 55—58, 168]. A diszlokációs töltésről alkali-halogenid kristályok esetén a nagyszámú, gyakran nem egybehangzó irodalmi adat alapján a következőket mondhatjuk. A tiszta, névlegesen tiszta és kétértékű kationokkal szennyezett kristályokban a diszlokáció negatív, az anionokkal erősen szennyezett kristályokban viszont pozitív töltésű. Alacsony hőmérsékleten szintén negatív töltést találtak [19, 59], ez jó összhangban van Tóth A. azon eredményével, hogy a diszlokáció töltéseinek mozgása nem, vagy alig követel termikus aktivációt [26].

A fordított Sztjepanov-effektussal kapcsolatos méréseket zömmel két csoportra oszthatjuk: egyik esetben az egyes diszlokációk elektromos tér által kiváltott mozgását vizsgálják maratási módszerrel [37, 41], a másik esetben a váltakozó elektromos tér a próbadarab rezgését eredményezi [40]. — Az első eset hiányossága, hogy maratással csak a felület környezetében levő diszlokációkról kapunk információt, amelyek eleve egészen más környezetben, más szennyező koncentráció mellett mozognak, mint azok, amelyek a kristály belsejében vannak. Ily módon az ezekben a kísérletekben kapott adatokat kevésbé lehet összevetni azokkal az adatokkal, amelyek a kristály belsejében levő diszlokációkra vonatkoznak. — A második esetben a próbadarabot váltakozó elektromos tér hatásának tették ki, amelynek frekvenciája egyenlő volt a próbadarab alapharmonikusának rezgésszámával [40]. A váltakozó elektromos tér mechanikus rezgést váltott ki a próbadarabon rendkívül kicsi amplitúdóval ( $\sim 10^{-2}$  nm). A diszlokáció-szegmentumok rezgésén alapuló elméleti modell elfogadhatóan írja le a jelenséget [45], habár szerintem elképzelhető más, optikai—akusztikai fonon—fonon kölcsönhatáson alapuló, nem a töltött diszlokációkból kiinduló értelmezés is. Érdekes megjegyezni, hogy a kísérletek szerint a kristály egy ideig tárolni tudja a váltakozó elektromos térből nyert energiát [60].

3. *Deformációs lumineszcencia.* Színezett alkali-halogenid kristályokat impulzus-szerűen deformáltak és mérték a deformáció miatt keletkezett lumineszcenciát. A lumineszcencia időbeli lefolyásából arra következtettek, hogy a diszlokációk mozgásuk során  $F$ -elektronokat abszorbeáltak, mintegy töltötté váltak. Ez az elektron egyrészt mozgott a diszlokáció vonala mentén, másrészt együtt mozgott a diszlokációval és valahol csapdába esvén lumineszcenciát okozott [61, 62]. Plasztikus deformáció esetén a lumineszcencia időbeli lefutásában két maximum figyelhető meg.



Az első maximum kését a deformációhoz képest az elektron migrációja okozza a diszlokációs zónában, a második maximum idejét a diszlokáció sebessége határozza meg [63]. Megjegyzendő, hogy az irodalom nem foglalkozott eleget a diszlokációs elektronnívó és a diszlokációk töltése közötti kapcsolattal [64, 69].

4. *Fotomechanikai jelenségek.* Fény hatására módosulnak az anyag mechanikai tulajdonságai. Az általánosan elfogadott értelmezés szerint az ide sorolt jelenségek oka a töltött diszlokációk mozgékonyságában beállott változás.

Színezett alkalihalogenid kristályokban J. S. Nadeau [70] megfigyelte a plasztikus folyási határ megváltozását megvilágítás hatására. A jelenséget azóta többen vizsgálták különböző szempontból [71–78]. Mérték az egyes diszlokációk mozgékonyságában beállott változást [79, 80], az ultrahang elnyelődésének megváltozását [78, 81–83] színezett alkalihalogenid kristályokban a megvilágítás hatására. Az általánosan elfogadott elképzelés szerint a fény hatására a töltött diszlokációk mozgékonyága megváltozik, de az irodalomban nem egységes az álláspont ennek a megváltozásnak a mechanizmusát illetően. Az egyik nézet szerint a diszlokáció körül kialakuló elektronfelhő és a felhővel kölcsönhatásba lépő szennyezők okozzák a kristály keményedését [76], mások szerint az  $F \rightarrow F'$  vagy hasonló átmenet, valamint a diszlokációs elektronnívón elfogott elektron okozza azt, hogy megnövekszik a töltött diszlokációk és a ponthibák közötti elektrosztatikus kölcsönhatás [72].

Hasonló jelenséget félvezetőkben is megfigyeltek, elsőnek Kuczynski és Hochman [86], majd mások [84, 85] adatokat közöltek arról, hogy különböző félvezetőkben, főképp infravörös fény hatására a felületi réteg keménysége nagymértékben csökken.

1968-ban, egy bizonyos fokig ellenkező jelenséget észleltek [87]: a látható fényrel megvilágított CdS kristály erős keményedést mutatott. Az effektus nagysága elérte a 100%-ot. A későbbiekben a jelenséget más  $A_{II}B_{VI}$  típusú kristályban is észlelték [88–91]. Kísérleti bizonyítékot nyertek arra vonatkozóan, hogy a jelenség a töltött diszlokációk mozgásával kapcsolatos [92, 93]. Oszipjan és Petrenko [94] magyarázata szerint a fény hatására fotolyukak keletkeznek, ezek lokalizálódnak valamilyen centrumon és ezen centrumok kölcsönhatása a töltött diszlokációval okozza a kristály megkeményedését. E megkeményedés infravörös fénnel megszüntethető [91], ez jól egyezik a fenti modellel: a csapdába esett fotolyukak az infravörös fény hatására delokalizálódnak, és így a lokalizált fotolyukak és töltött diszlokációk kölcsönhatása okozta megkeményedés megszűnik.

5. Az irodalomban jelentek meg olyan munkák, amelyek szerint a töltött diszlokációk *ferromágneses tulajdonságot* kölcsönöznek az alkalihalogenid kristályoknak [95, 96]. A töltött diszlokáción rendezett spin orientációt tételeznek fel, azonban a magyarázatokhoz túlságosan nagy, kb. 1 elektron/Å elektronsűrűséget kell feltételezni a diszlokáción.  $10^{-6}\%$   $Fe_2O_3$  szennyező képes hasonló nagyságú effektust okozni. Már korábban több munkában vizsgálták a diszlokáción lokalizált elektronnívó kérdését, [68]-ban kifejezetten a fent említett ferromágneses jelenséggel kapcsolatban, de mindeddig nincs erre vonatkozó közvetlen kísérleti bizonyíték. Az irodalomban nincs utalás olyan kísérletre, amelyben plasztikus deformációval változtatva a diszlokáció sűrűséget, vizsgálták volna a kristályok mágneses tulajdonságainak változását.

6.  $A_{II}B_{VI}$ , ill.  $A_{III}B_V$  típusú *félvezetőkben* az ionkristályokkal szemben, energetikailag lehetségesek olyan éldiszlokációk, amelyekben a felesleges félsík



élén levő valamennyi atom ugyanolyan típusú. Ennek megfelelően ha a diszlokációs felsík A atomokkal végződik  $\alpha$ -, ha B atomokkal, akkor pedig  $\beta$ -diszlokációról beszélünk. Ezek a diszlokációk az A, ill. B atomokon levő kompenzálatlan töltések miatt jelentős elektromos töltéssel rendelkeznek, és nagymértékben befolyásolják környezetük elektromos viszonyait [93, 97—103]. Az n-típusú InSb kristályban az  $\alpha$ -diszlokáció környezete p típusú volt, ugyanekkor a lyuk-típusú vezetéssel bíró InSb kristály  $\beta$ -diszlokációk bevitelét után elektron-típusúvá vált [104]. *Bell és Villoughby* azt találták, hogy n-típusú InSb egykristályban mind az  $\alpha$ -, mind a  $\beta$ -diszlokációk akceptor centrumokként viselkedtek, megállapításuk szerint az  $\alpha$ -diszlokáció által létrehozott nívó a tiltott sáv közepe táján helyezkedik el, míg a  $\beta$ -diszlokáció szint a vegyértéksáv közelében van [100].

Várható az ilyen diszlokációk mint elektronikus elemek felhasználása [104], ill. a bikristályok szemcsehatárát kihasználva (amit lényegében diszlokációk alkotnak) már több eszközt is létrehoztak [105]. Meg kell jegyezni, hogy az  $\alpha$  és  $\beta$  típusú töltött diszlokációk a félvezető lézerekben is jelentős, jóllehet általában nemkívánatos szerepet játszanak [105].

A nem poláros félvezetőkben is töltöttek lehetnek a diszlokációk, ebben a témakörben az utóbbi időben egy részletes áttekintést jelent meg hazai szerző tollából [195].

7. *Ionkristályok hasítása* után a hasított felület elektromosan aktív. A jelenségről már *Faraday* is említést tett [106]. A jelenséget különféleképpen értelmezték, főképp a *Sztyepanov-effektus* általánosan elfogadott magyarázatához analóg módon. Az újabb vizsgálatok [107, 108] fényében, amelyek szerint dielektrikumból készült kés használata esetén az elektromos tér a két hasított felületre nézve tükrörszimmetriát mutat, azt kell elfogadni, hogy a hasításkor fellépő elektromos tér a felszakadt ionos kötések inhomogén eloszlásából ered [109]. Mint *Sárközi J.* és *Voszka R.* kimutatták, a próbadarabban levő szennyezések koncentrációja nagyon erősen befolyásolja a hasított felületen fellépő elektromos töltés nagyságát [110].

A próbadarab hőkezelésével szintén lényeges változást tudtak létrehozni a hasítás utáni felületi töltés nagyságában. Meg kell jegyezni, hogy ilyen szempontból szinte az egész kísérleti irodalmat kritikusan kell fogadni, hiszen kristályhibák kölcsönhatását eldöntendő kérdésekben a legtöbb szerző által használt „névlegesen” (!) tiszta kristály tisztasága messze nem elegendő, bizonyos értelemben egy kontrollálatlan objektumon végzett kutatásokról van szó ilyen esetekben.

8. A megfigyelések szerint az alkali-halogenid kristályokon végigfutó *lökéshullám* elektromos jellel párosul [111—115]. Egyes szerzők szerint a lökéshullám a töltött diszlokációk dinamikus mozgása [115], mások szerint ugyanott orientált kation—kation-hiányhely dipólusok keletkezése [114, 116] okozza a jelenséget.

Megemlítjük még, hogy a *Rehbinder-effektus* [157], a *fotokémiai reakció* [158] és a *Joffe-effektus* [196] is kapcsolatban lehet a diszlokációk elektromos töltésével.

Az ionkristályokban a diszlokáció töltését illetően az irodalom a *Seitz* által felvetett modellt fogadta el [153], amely szerint a diszlokáció töltését a diszlokáció vonal elemi lépcsői (jogjai) okozzák. Ha egy ilyen lépcsőhöz hozzáadunk egy iont, töltése az ellenkezőjére változik, vagyis a lépcsők töltése az ionok töltésének a fele. Ez különösen egyvegyértékű ionkristályok esetén érdekes, mert ilyenekben ez a töltés kisebb, mint az elektron töltése, vagyis nehezen kompenzálható. A diszlokáció lépcsők térbeli szerkezetének szemléletes képe látható *Brantley* és *Bauer* munkájában [161]. A lépcsők hiányhelyeknek a diszlokációval való kölcsönhatásából származnak.



*Eshelby* és *társai* szerint [154], mivel NaCl típusú rácsban a kation hibahelyek keletkezési energiája kisebb, ezért belőlük több diffundál a kristály belsejébe, és ez határozza meg a diszlokáció töltését. *Lifshic* és *társai* [155, 156] ezt a gondolatmenetet termodinamikailag hibásnak tartják, szerintük a töltés a különböző hibahelyek különböző oldékonyságával kapcsolatos a diszlokáció környezetében. A töltött diszlokáció-vonalat egy ellenkező előjelű kompenzáló atmoszféra, a Debye—Hückel-felhő veszi körül [154]. A diszlokáció mozgása során csak az édiszlokációk viszik magukkal a töltést [53, 159], de lehetséges a töltés mozgása a diszlokáció vonal mentén is [160].

A továbbiakban röviden áttekintjük a diszlokációk kölcsönhatását a ponthibákon lokalizált fononokkal. A ponthibákon lokalizált rezgések és a diszlokációk kölcsönhatását egyszerű formában már Frenkel és Kontorova is tárgyalták [118], a téma bonyolultságával lehet magyarázni, hogy aránylag kevés cikk jelent meg ezen a területen. Szintén a téma bonyolultságával magyarázható, hogy a szerzők által választott közelítések általában nem kielégítőek. *Koszevics* és *Nacik* [120] például egyébként nagyon alapos munkájukban a diszlokáció mozgását nem relativisztikusan tárgyalják egy eleve relativisztikus tárgyalásmódot követelő problémában.

*Takamura* és *Morimoto* [121] a valóságban soha meg nem valósuló lökészerű közelítésben ( $\omega\tau \ll 1$ , ahol  $\tau$  az effektív kölcsönhatási idő és  $\omega$  a lokális rezgés körfrekvenciája) vizsgálták a kérdést. Ezután szinte komikusnak hangzik, hogy *Kaneda* [122] rézötvözetben aránylag kis sebességek mellett kapott ( $\omega\tau \gg 1$ ) kísérleti eredményeit a *Takamura—Morimoto*-féle  $\omega\tau \ll 1$  közelítéssel kapott elméleti számításokkal vetette egybe. *A. I. Landau* a Frenkel—Kontorova-módszert terjesztette ki a Peierls—Nabarro-diszlokációkra, de csak a csúszási síkban levő atomokat vette figyelembe [123]. A legjobbak *Ljubov* és *Csernizer* munkái ezen a területen [124—126], de számszerű következtetések főleg csak nagyon nehéz szennyezők esetén tűnnek megbízhatónak.

## 2.2. A momentumok módszere

Az elnyelési és kibocsátási színekép formája gyakran, pl. magas hőmérsékleten vagy erős elektron—rács kölcsönhatás esetén, jellegzetesen harang-görbe alakú, amelyet első közelítésben Gauss-függvénnyel írhatunk le. A színeképet sűrűség-függvényként felfogva, használhatjuk vizsgálatánál a matematikai statisztikában kifejlesztett módszereket, így a momentumok módszerét is [127].

Az  $f(x)$  sűrűség-függvény  $l$ -edik momentumán ( $\tilde{M}_l$ ) a következő kifejezést értjük:

$$\tilde{M}_l = \int_G x^l f(x) dx \quad (2.2.1)$$

ahol  $G$  az  $x$  értelmezési tartományát jelöli.

Szemléletesség kedvéért tételezzük fel, hogy  $f(x)$  tömegeloszlást jellemez az  $x$  tengely mentén, akkor a nulladik momentum ( $\tilde{M}_0$ ) az egész tömeget adja meg, az első momentum az  $\langle x \rangle = \frac{\tilde{M}_1}{\tilde{M}_0}$  súlypontot, a második az  $x=0$  tengelyre vonatkoztatott tehetetlenségi nyomatékot jellemzi.



Gyakran használják az  $\tilde{M}_l$  helyett a centrális momentumokat ( $\tilde{S}_l$ ):

$$\tilde{S}_l = \int_G \left( x - \frac{\tilde{M}_1}{\tilde{M}_0} \right)^l f(x) dx = \sum_{i=0}^l (-1)^i \binom{l}{i} \left( \frac{\tilde{M}_1}{\tilde{M}_0} \right)^i \tilde{M}_{l-i}. \quad (2.2.2)$$

Általában  $M_0=1$ -re normált momentumokat használnak: ( $M_l$ , ill.  $S_l$ ):

$$M_l = \frac{1}{\tilde{M}_0} \int_G x^l f(x) dx; \quad S_l = \frac{1}{\tilde{M}_0} \int_G (x - M_1)^l f(x) dx. \quad (2.2.3)$$

Mivel a színekép közel Gauss-függvény, néhány első momentumának ismeretében a függvényt jól lehet approximálni. Különösen alkalmas erre az Edgeworth-képlet [128], amelyben a könnyen kezelhető Gauss-függvény és annak deriváltjai szerepelnek:

$$f(x) = \tilde{M}_0 \sqrt{S_2} \left[ \varphi(z) - \frac{\gamma_1}{3!} \varphi^{(3)}(z) + \frac{\gamma_2}{4!} \varphi^{(4)}(z) + \frac{10\gamma_1^2}{6!} \varphi^{(6)}(z) + \dots \right] \quad (2.2.4)$$

ahol

$$z = \frac{x - M_1}{\sqrt{S_2}}; \quad \varphi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}}$$

$$\gamma_1 = S_3 S_2^{-\frac{3}{2}}; \quad \gamma_2 = S_4 S_2^{-2} - 3.$$

Az Edgeworth-képlet első tagja megadja a Gauss-függvényt, a második tag aszimmetriát visz be a kifejezésbe, a harmadik és a negyedik tag a szárnyak és a maximum közötti arányt helyesbíti.

*Van Vleck* mutatott rá elsőnek [129], hogy a színeképek számolásánál hatásosan használható a momentumok módszere. A gondolat lényege az, hogy amíg a színekép kiszámolásához ismerni kellene a hullámfüggvényeket, az első momentumok előállíthatók mint diagonális összegek és kiszámolásuk bármely alkalmas reprezentációban elvégezhető. Az optikai elnyelési színeképre *M. Lax* alkalmazta ezt elsőnek [130], munkáját több hasonló jellegű cikk követte [131–133].

A momentumok módszerének egy újabb megfogalmazást adott *J. J. Markham* [134], és végül *Henry*, *Schnatterly* és *Slichter* egy olyan változatot (HSS-módszer) dolgozott ki, amelyik lehetővé teszi a színekép momentumainak konkrét kiszámítását. A következőkben a HSS-módszert ismertetjük [135], de a későbbiekre való tekintettel kissé módosított formában. Az optikai elnyelési színekép az

$$\alpha_\eta(E) = -\frac{1}{I} \frac{dI}{dz} = \frac{EW_\eta(E)}{I} \quad (2.2.5)$$

formulával írható le [135], ahol  $I$  a  $z$  tengely irányában terjedő fény intenzitása,  $E$  a foton energiája,  $W(E)$  pedig az egységnyi térfogatban indukált átmeneti valószínűség;  $\eta$  index utal a fény polarizációs viszonyaira. Az elméleti számításokat legkellemesebb a vonalalak-függvényen végezni ( $f(E)$ ), amelyet a következő összefüggés definiál

$$f_\eta(E) = \frac{W_\eta(E)}{c \cdot I} = \sum_I v_I \sum_F |\langle F | P_\eta | I \rangle|^2 \delta(E_F - E_I - E) \\ c = \frac{4\pi^2 N}{\hbar c n_0} \left( \frac{E_{\text{eff}}}{E_0} \right)^2, \quad (2.2.6)$$



ahol  $v_I$  a kezdeti állapotok termikus betöltöttsége,  $|I\rangle$  és  $|F\rangle$  megfelelően a kezdeti és végállapotok hullámfüggvényei,  $E_I$  és  $E_F$  a megfelelő energiák,  $N$  a pont-hiba koncentrációja,  $n_0$  az ép kristály törésmutatója,  $\left(\frac{E_{\text{eff}}}{E_0}\right)$  pedig a lokális és makroszkopikus elektromos tér aránya.

A ponthibát és környezetét leíró Hamilton-függvényt a következő alakban írjuk fel:

$$H = H_{(0)} + H''; \quad H_{(0)} = H_0 + H'$$

$$H_0 = H_E(r) + H_L(Q); \quad H' = H_{EL}(r, Q) + H_{SO}(r, s). \quad (2.2.7)$$

$H_E(r)$  az elektron Hamilton-operátora a spin-pálya kölcsönhatás elhanyagolásával és rögzítve a rácsot abban az egyensúlyi helyzetében, amivel akkor rendelkezik, amikor az elektron alapállapotában van ( $Q=0$ ).  $Q$  jelöli a rács állapotát.  $F$ -centrum esetén:

$$H_E(r) = \frac{p^2}{2m} + V(r). \quad (2.2.8)$$

Feltételezzük, hogy  $H_E$ -nek van egy  $|i\rangle$  szingulett alapállapota és  $|f\rangle$  stb. gerjesztett állapota, a megfelelő sajátenergiák pedig  $E_i, E_f$  stb. A hullámfüggvényekről feltesszük, hogy a szomszédos atomok elektronállapotaira ortogonálisítottak (Pauli-elv).

$H_L(Q)$  a rács Hamilton-operátora:

$$H_L(Q)|l\rangle = E_l|l\rangle, \quad (2.2.9)$$

ahol  $|l\rangle$  a rács rezgési állapotát leíró hullámfüggvények.

$H_{EL}$  az elektron—rács kölcsönhatást leíró tag, feltételezzük, hogy lineárisan függ a rács normál koordinátáitól ( $Q_i$ ):

$$H_{EL}(r, Q) = \sum_j V_j(r) Q_j. \quad (2.2.10)$$

Tekintettel arra, hogy  $Q_j=0$  a rács egyensúlyi állapota az elektron alapállapotában ( $|i\rangle$ ):

$$\langle i|V_j(r)|i\rangle = 0. \quad (2.2.11)$$

$H_{SO}$  a spin-orbitális kölcsönhatást leíró tag,  $H''$  írja le azt a perturbációs teret, aminek a hatására az elnyelési színek megváltozik.

$H_0$  nem keveri össze az elektron, spin és rács hullámfüggvényeket, így  $H_0$  sajátvektorai  $H_E$  és  $H_L$  sajátvektorainak szorzataként felírhatók.  $H_{(0)}$ , ill.  $H$  sajátállapotát elő lehet állítani  $H_0$  sajátvektorainak olyan lineáris kombinációjaként, amelyek diagonalizálják a megfelelő Hamilton-operátort, ( $H_{(0)}$ -t, ill.  $H$ -t).

Közelítésképpen feltesszük, hogy az alapállapotok ( $|I\rangle$ ) faktorizáltak:

$$|I\rangle = |i\rangle|m\rangle|l\rangle, \quad (2.2.12)$$

ahol  $|m\rangle$  a spin állapotok hullámfüggvényei; a gerjesztett állapotok ( $|F\rangle$ , ill.  $|G\rangle$ ) pedig olyan  $|D\rangle$  hullámfüggvények lineáris kombinációi, amelyekre  $|D\rangle = =|f\rangle|m\rangle|l\rangle$ , ahol az  $|f\rangle$  első gerjesztett, közel degenerált elektronállapotok (pl.  $F$ -centrum esetén  $2s$  és  $2p$  típusúak). Így a HSS-módszer elhanyagolja a nem



degenerált elektron állapotok  $H'$ , ill.  $H''$  általi összekeveredését. Az  $|F\rangle$ , ill.  $|G\rangle$  állapotokra nézve megköveteljük, hogy:

$$\langle F|H_{(0)}|F'\rangle = E_F\delta_{FF'}; \quad \langle G|H|G'\rangle = E_G\delta_{GG'}. \quad (2.2.13)$$

Az alapállapot kielégít egy, a (2.2.13)-hoz hasonló összefüggést:

$$\begin{aligned} \langle I|H|I'\rangle &= (E_i + E_l + \langle i|\langle m|H''|m\rangle|i\rangle)\delta_{II'} \\ E_i &= \langle i|H_E|i\rangle. \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

A momentumok definíciójának megfelelően

$$\tilde{M}_0 = \int dE f_\eta(E) = \sum_I v_I \sum_F \langle I|P_\eta^+|F\rangle \langle F|P|I\rangle. \quad (2.2.15)$$

Kihasználva azt, hogy az  $|F\rangle$  állapotok  $|D\rangle$  állapotok lineáris kombinációi, így  $\sum_F |F\rangle \langle F| = \sum_D |D\rangle \langle D|$  (megjegyezzük, hogy ez a Van Vleck-től származó gondolat [129] a momentumok módszerének lényege) és azt, hogy az  $|I\rangle$  és  $|m\rangle$  állapotokra kielégül a teljesség feltétele  $\sum |I\rangle \langle I| = 1$ , ill.  $\sum |m\rangle \langle m| = 1$ , és így:

$$\sum_F |F\rangle \langle F| = \sum_f |f\rangle \langle f|. \quad (2.2.16)$$

Behelyettesítve (2.2.16)-t (2.2.15)-be:

$$\tilde{M}_0 = \sum_{l,m} v_{lm} \langle l|\langle m| \sum_f \langle i|P_\eta^+|f\rangle \langle f|P|i\rangle |l\rangle |m\rangle. \quad (2.2.17)$$

Tekintettel arra, hogy  $|i\rangle$  és  $|f\rangle$  állapotfüggvények csak az elektron koordinátáitól függenek és a  $P$  operátor nem hat a spin és rács állapotokra:

$$\tilde{M}_0 = \sum_f \langle i|P_\eta^+|f\rangle \langle f|P_\eta|i\rangle. \quad (2.2.18)$$

Ugyanígy számolhatjuk a további momentumokat is, feltételezve, hogy  $H''$  még nincs bekapcsolva:

$$M_1 = \frac{1}{\tilde{M}_0} \int E f(E) dE = \frac{1}{\tilde{M}_0} \sum_I v_I \sum_F \langle F|P_\eta|I\rangle^2 (E_F - E_I). \quad (2.2.19)$$

Felhasználva a (2.2.13) és a (2.2.16) összefüggéseket:

$$\begin{aligned} M_1 &= \frac{1}{\tilde{M}_0} \sum_I v_I \sum_{FF'} \langle I|P_\eta^+|F\rangle \langle F|H_{(0)} - E_I|F'\rangle \langle F'|P_\eta|I\rangle = \\ &= \frac{1}{\tilde{M}_0} \sum_{lm} v_{lm} \langle l|\langle m| \sum_{ff'} \langle i|P_\eta^+|f\rangle \langle f|H_{(0)} - E_I|f'\rangle \langle f'|P_\eta|i\rangle |l\rangle |m\rangle. \end{aligned} \quad (2.2.20)$$

Mivel

$$\begin{aligned} \langle f|H_E|f'\rangle &= \delta_{f'f} E_f; \quad E_I = E_i + E_l \\ H_L|i\rangle &= E_l|i\rangle; \quad \sum_m v_m \langle m|H_{SO}|m\rangle = 0 \end{aligned} \quad (2.2.21)$$

a (2.2.20) kifejezés a következő egyszerű alakot ölti:

$$\bar{E} = M_1 = E_f - E_i. \quad (2.2.22)$$



Hasonlóan kiszámíthatók a felsőbb momentumok is, de a módszer lényege nem ez, hanem a momentumok megváltozásának a kiszámítása abban az esetben, amikor a  $H''$  is hat.

Írja le  $H''$  jelenléte esetén a gerjesztett állapotokat a  $|G\rangle$  állapotfüggvény, és a szinkép vonalfüggvénye legyen:

$$g_{\eta}(E) = \sum_I v'_I \sum_G | \langle G | P_{\eta} | I \rangle |^2 \delta(E_G - E_I - E) \quad (2.2.23)$$

ahol  $v'_I$  a  $H''$  bekapcsolása után a kezdeti állapotok betöltöttsége.  $v'_I$  és  $v_I$  megkülönböztetése a spin állapotokra ható  $H''$  esetén lényeges. A (2.2.18) és (2.2.20) összefüggések levezetésével analóg módon megkapjuk, hogy  $H''$  bekapcsolása nem változtatja meg a vonalalak-függvény nulladik momentumát:

$$\Delta \tilde{M}_0 = \int [g(E) - f(E)] dE = 0 \quad (2.2.24)$$

és így a centrális, egyre normált momentumok változása:

$$\Delta S_i = \frac{1}{\tilde{M}_0} \int (E - M_1)^i [g(E) - f(E)] dE. \quad (2.2.25)$$

Hasonló módon, kihasználva a  $\sum_G |G\rangle \langle G| = \sum_f |f\rangle \langle f|$  összefüggést és (2.2.24)-t:

$$\Delta M_1 = \frac{1}{\tilde{M}_0} \sum_m v_m \langle m | \sum_{ff'} \langle i | P_{\eta}^+ | f \rangle \langle f | H_1 | f' \rangle \langle f' | P_{\eta} | i \rangle | m \rangle \quad (2.2.26)$$

és

$$\begin{aligned} \Delta S_2 = & \frac{1}{\tilde{M}_0} \sum_m v'_m \langle m | \sum_{ff'f''} \langle i | P_{\eta}^+ | f \rangle \langle f | H_1 | f' \rangle \langle f' | H_1 | f'' \rangle \langle f'' | P_{\eta} | i \rangle | m \rangle - \\ & - \frac{1}{\tilde{M}_0} \sum_m v_m \langle m | \sum_{ff'f''} \langle i | P_{\eta}^+ | f \rangle \langle f | H_{so} | f' \rangle \langle f' | H_{so} | f'' \rangle \langle f'' | P_{\eta} | i \rangle | m \rangle \end{aligned} \quad (2.2.27)$$

ahol

$$H_1 = H'' + H_{so} - \langle m | i | H'' | i \rangle | m \rangle.$$

Hasonlóan számolhatók magasabb rendű momentumok is, de azokat általában nehéz kísérleti eredményekkel összehasonlítani.

Összefoglalva,  $H''$  hatására nem változott meg a nulladik momentum, és ha a perturbációs tag nem hat a spin állapotra, akkor az első és második momentum megváltozása csak  $H''$ -től függ.

A HSS-módszer egyik fontos alkalmazását és kísérleti igazolását jelentették az  $F$ -centrumon végzett Stark-effektus mérések [136, 137], ahol kísérleti bizonyítékot nyert a nulladik és első momentumok HSS-módszer által megjósolt változatlan-sága, igaz, hogy a második momentum megváltozása kisebbnek adódott, mint az elméleti számítások alapján várni lehetett volna [138]; a HSS-módszer alapján a kísérletből kiszámított  $\langle 2s | z | 2p \rangle$  mátrixelemek több mint kétszer kisebbek, mint azt a létező  $F$ -centrum modellek alapján várni lehetne.

Az utóbbi időben Bonciano és Grassano [197] a HSS-elméletet kiterjesztette magasabb ( $3s$ , ill.  $3d$  stb.) átmenetekre és valamivel jobb illesztést tudtak így kapni, de a  $\langle 2s | z | 2p \rangle$  stb. mátrixelemek esetükben még lényegesen kisebbek lettek, ami módszerük általános érvényét erősen kérdésessé teszi.



### 2.3. A koherens állapotok

A koherens állapot fogalmát *R. J. Glauber* vezette be és jelentős eredményeket ért el ezen a téren [139—141]. Lényegében a koherens állapotok sokkal korábbiak ismertek, már *Schrödinger* foglalkozott velük [142], és nagyon szoros kapcsolatban vannak a *J. R. Klauder* által vizsgált folyamatos reprezentációk elméletével [143]. Szinte az összes fizikai problémát lehet tárgyalni a koherens állapotok formalizmusa segítségével [144]. Ez a módszer különösen alkalmas olyan rendszerek vizsgálatára, amelyek Hamilton-operátora kvadratikussal van megadva. Tekintettel arra, hogy a 4. fejezetben használni fogjuk, röviden ismertetjük a koherens állapotok főbb tulajdonságait, az egyszerűség kedvéért a kvantum oszcillátor állapotaira szorítkozva (a Hilbert-terek izomorfizmusa miatt egy  $n$ -dimenziójú kvantumtér leképezhető az  $n$ -dimenziójú kvantum oszcillátor állapotrendszerére).

Legyen  $a^+$  és  $a$  operátor az „emissziós”, ill. az „abszorpciós” operátor:

$$a^+ = \frac{x - ip}{\sqrt{2}}; \quad a = \frac{x + ip}{\sqrt{2}}, \quad (2.3.1)$$

akkor létezik olyan  $|\alpha\rangle$  állapot, amely sajátvektora az abszorpciós operátornak.

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle; \quad \langle\alpha|a^+ = \alpha^*\langle\alpha| \quad (2.3.2)$$

ahol  $\alpha$  tetszőleges komplex szám.  $|\alpha\rangle$  kifejezhető a kvantum oszcillátor szokásos  $|n\rangle$  hullámfüggvényein keresztül:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (2.3.4)$$

Megemlítené, hogy mint (2.3.4) alapján látható, az  $\alpha=1$  hullámfüggvény nem azonos az  $n=1$  hullámfüggvénnyel, jóllehet ez igaz  $\alpha=0$  és  $n=0$  esetén. A koherens állapotok előállíthatók a  $|0\rangle$  alapállapotból egy unitér transzformációval:

$$|\alpha\rangle = D(\alpha)|0\rangle; \quad D(\alpha) = e^{\alpha a^+ - \alpha^* a} \quad (2.3.5)$$

(2.3.5)-ből következik a koherens állapotok egyre normáltsága

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle 0|D^{-1}(\alpha)D(\alpha)|0\rangle = \langle 0|0\rangle = 1. \quad (2.3.6)$$

Ezzel szemben a koherens állapotok nem ortogonálisak, mint a (2.3.5)-ből következik

$$\langle\alpha|\beta\rangle = e^{-\frac{|\alpha-\beta|^2}{2} + i \operatorname{Im}(\alpha^* \beta)}. \quad (2.3.7)$$

Érdekes megemlíteni, hogy *Neumann János* [145] bizonyította be, hogy az  $|\alpha\rangle$  koherens állapotok részhalmazát alkotó  $|\sqrt{\pi}(l+im)\rangle$  állapotok, ahol  $l$  és  $m$  tetszőleges egész számok, lefedik a Hilbert-teret. Koherens állapotok segítségével felírható  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$  tetszőleges állapotok skalárszorzata

$$\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle = \int d^2\alpha \langle\varphi_1|\alpha\rangle \langle\alpha|\varphi_2\rangle; \quad d^2\alpha = d(\operatorname{Im} \alpha) d(\operatorname{Re} \alpha) \quad (2.3.8)$$

operátorok szorzata,

$$\langle\alpha|B_1 B_2|\beta\rangle = \int d^2\gamma \langle\alpha|B_1|\gamma\rangle \langle\gamma|B_2|\beta\rangle. \quad (2.3.9)$$



A koherens állapotok egyik legcsodálatosabb tulajdonsága, hogy minden véges operátor előállítható velük a következő diagonális formában

$$A = \int \varphi(\alpha) |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha. \quad (2.3.10)$$

A sűrűségmátrixot felírhatjuk ugyanígy (ún.  $P$ -reprezentáció [141]):

$$\varrho = \int P(\alpha) |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha. \quad (2.3.11)$$

Itt bizonyos problémát vet fel, hogy  $P(\alpha)$  lehet disztribúció is, pl. a tiszta  $|\alpha\rangle$  állapotokhoz tartozó  $P(\beta)$ :

$$P(\beta) = \delta^2(\beta - \alpha) = \delta(\text{Re}[\alpha - \beta])\delta(\text{Im}[\alpha - \beta]). \quad (2.3.12)$$

Ezt elkerülendő időnként egy másik, nem diagonális reprezentációt is használnak:

$$\varrho = \int d^2\alpha \int d^2\beta \langle \alpha | \varrho | \beta \rangle |\alpha\rangle \langle \beta|$$

ahol az  $\langle \alpha | \varrho | \beta \rangle$  súlyfüggvény, szemben  $P(\alpha)$ -val, általában közönséges függvény.

#### 2.4. Gyorsan mozgó diszlokációk mechanikus tere, együttmozgó gyors diszlokációk kölcsönhatása

A diszlokációk terét leíró képletek általában nem veszik figyelembe a diszlokáció mozgását. Ez a sztatikus tárgyalásmód általában korrekt, mert a diszlokációk a kísérleti körülmények nagy részében olyan lassan mozognak, hogy a dinamikus effektusok nem játszanak szerepet.

Az elmúlt másfél évtizedben azonban a gyors diszlokációk iránti érdeklődés megnőtt a lökéshullámokkal és az általuk keltett repedésekkel kapcsolatban [146].

Csavardiszlokáció esetén ez a változás a Lorentz-transzformációhoz hasonló relativisztikus képletekkel írható le [147], amelyekben a  $c$  fénysebesség szerepét a transzverzális hanghullámok sebessége ( $c_t$ ) veszi át:

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c_t^2}}}; \quad y' = y; \quad z' = z$$

$$t' = \frac{t - \frac{vx}{c_t^2}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c_t^2}}}. \quad (2.4.1)$$

Éldiszlokációk esetén a helyzet lényegesen bonyolultabb, mert mind a transzverzális, mind a longitudinális hanghullámok sebessége ( $c_t$ ) szerepet játszik, az utóbbi azért, mert éldiszlokációk esetén a térfogati dilatáció nem nulla.

Az éldiszlokáció terét dinamikus tárgyalásban Eshelby [148], valamint R. Bulloch és B. A. Bilby [149] számolták. A feszültségter komponensei rugalmas izotrop közelítésben, a diszlokációval együtt  $v$  sebességgel mozgó polárkoordináta-rend-



szerben a következők (a diszlokáció az  $y=0$  csúszási síkjában  $x$  irányban mozog  $v$  sebességgel, az extra félsík az  $y>0$  térfélben van):

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= -\frac{bc_t^2 \sin \varphi}{\pi r v^2} \left[ \frac{\lambda + 2\mu - \lambda \left(1 - \frac{v^2}{c_t^2}\right)}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c_t^2} \sin^2 \varphi} + \frac{\cos^2 \varphi}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c_t^2}}}} - \frac{\mu \left(2 - \frac{v^2}{c_t^2}\right)}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c_t^2} \sin^2 \varphi} + \frac{\cos^2 \varphi}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c_t^2}}}} \right] \\ \sigma_{yy} &= -\frac{bc_t^2 \sin \varphi}{\pi r v^2} \left[ \frac{\lambda - (\lambda + 2\mu) \left(1 - \frac{v^2}{c_t^2}\right)}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c_t^2} \sin^2 \varphi} + \frac{\cos^2 \varphi}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c_t^2}}}} + \frac{\mu \left(2 - \frac{v^2}{c_t^2}\right)}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c_t^2} \sin^2 \varphi} + \frac{\cos^2 \varphi}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c_t^2}}}} \right] \\ \sigma_{xy} &= \frac{\mu bc_t^2}{2\pi r v^2} \left[ \frac{\left(2 - \frac{v^2}{c_t^2}\right)^2 \frac{\cos \varphi}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c_t^2}}}}{\left(1 - \frac{v^2}{c_t^2}\right) \sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi} - \frac{4 \cos \varphi}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c_t^2} \sin^2 \varphi} + \frac{\cos^2 \varphi}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c_t^2}}}} \right] \quad (2.4.2)\end{aligned}$$

ahol  $\lambda$  és  $\mu$  Lamé konstansok.

A feszültségtér erősen függ a sebességtől. Különösen érdekes a nyírási feszültség ( $\sigma_{xy}$ ) sebességfüggése, amely előjelet vált a csúszási síkban

$$\left(2 - \frac{v^2}{c_t^2}\right)^4 = 4 \left(1 - \frac{v^2}{c_t^2}\right) \left(1 - \frac{v^2}{c_t^2}\right) \quad (2.4.3)$$

sebességnél.

Ezen egyenlet megoldása az ún. Rayleigh-sebesség ( $c_R$ ), a felületi hullámok sebessége:

$$c_R = \xi c_t, \quad (2.4.4)$$

ahol a (2.4.3)-ból következően  $\xi$  kielégíti a

$$\xi^6 + 8\xi^4 + 8\xi^2 \left(3 - 2 \frac{c_t^2}{c_l^2}\right) - 16 \left(1 - \frac{c_t^2}{c_l^2}\right) = 0 \quad (2.4.5)$$

egyenletet.

A (2.4.5) egyenletnek egyetlen fizikai jelentéssel bíró megoldása van,  $\xi$  értéke a  $\frac{c_t}{c_l}$  aránytól függően 0,874 és 0,955 közé esik.

A  $\sigma_{xy}$  nyírási feszültség előjelváltásával együtt  $v=c_R$  sebességnél előjelet vált az egyforma sebességgel mozgó éldiszlokációk között ható erő is; míg  $v < c_R$  sebességeknél az ellenkező mechanikai előjelű diszlokációk vonzzák, az azonos előjelűek pedig taszítják egymást,  $v > c_R$  esetén ez a törvényszerűség a visszájára fordul, amint azt Weertman energetikai megfontolásokból kimutatta [151].

*J. Weertman* rámutatott arra [150], hogy ez az anomália a gyorsan mozgó azonos előjelű diszlokációk „összeolvadásához” vezethet egy gigantikus diszlokációba és végső soron repedéseket okozhat. Ez különösen jelentősnek tűnik, ha meggondoljuk, hogy terheléseknél gyakori egy-egy csúszási síkban sok diszlokáció megjelenése.

A 4.2. fejezetben tárgyalni fogunk egy olyan, együttmozgó diszlokációk között fellépő kölcsönhatást, amelyik a Weertman-féle repedési mechanizmus hatását befolyásolhatja.

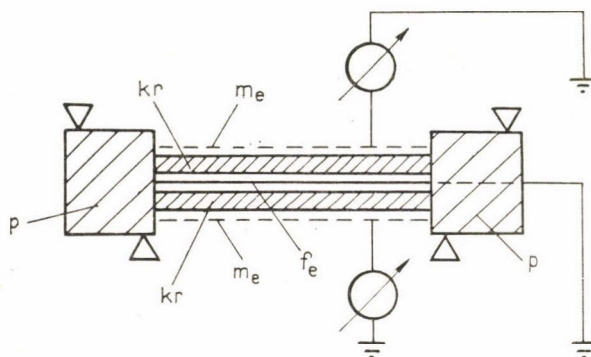
## II. SAJÁT VIZSGÁLATOK

### 3. A diszlokációs fotovezetési spektrum

#### 3.1. A kísérleti metodika

Méréseinkben különböző alkali-halogenid kristályokat használtunk, így az intézetünkben kifejlesztett módszerrel [164–166] OH-mentesen növesztett extrém tiszta KCl (kétértékű fémion szennyező koncentrációja  $<10^{-8}$  mol/mol) és NaCl (kétértékű fémion szennyező koncentrációja  $<2 \cdot 10^{-7}$  mol/mol) kristályokat, valamint Kyropoulos módszerével levegőn növesztett NaCl, NaBr, KCl, KBr és KI egykristályokat. A kísérleti darabok méretei a következők voltak: hossz  $\sim 18$ – $20$  mm, szélesség  $\sim 1$ – $10$  mm, vastagság  $1$ – $3$  mm. A próbadarabokat az  $1$ – $3$  mm-es élre merőlegesen kettéhasítottuk és valamilyen vezető (ólomlemez, acéllemez, fémháló) közbeiktatásával összeragasztottunk. Az így felmontírozott kristályt színeztük mélyterápiás röntgenkészülékben ( $U \sim 150$  kV,  $I \sim 20$  mA) különböző, általában kb.  $10^{16}$  F-centrum/cm<sup>3</sup> koncentrációig.

A színezést időnként deuteron vagy  $\beta$ -sugárzás segítségével, ill. additív módon végeztük. A már megszínezett próbadarabokat az 1. ábra szerint négyponthoz hajlításhoz vetettük alá. A hajlításhoz a rögzítőek nem a kristályon (kr), hanem plexiüveg hasábokon (p) voltak. A készülék belsejében a deformálás és mérés közben kb.  $10^{-4}$  Hgmm vákuum volt. A mechanikailag semleges rétegben levő közbe-



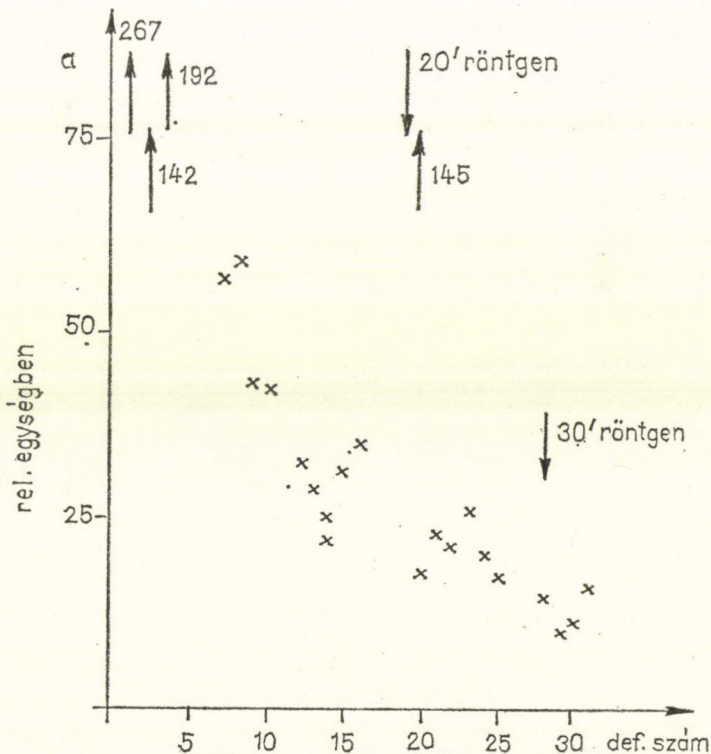
1. ábra. A mérési elrendezés: kr — kristály, me — mérőelektroda, f<sub>e</sub> — földelt elektróda, p — plexiüveghasáb



iktatott vezetőt ( $f_e$ ) földeltük, és a vele szemközti kristályfelület közelébe vezető-üveg vagy fémháló mérőelektrodot ( $m_e$ ) helyeztünk el, amelyeket egy rezgőkondenzátoros elektrométerhez csatoltunk. Ily módon mértük a mérőelektrodok és a földelt vezető között a hajlítás folytán fellépő elektromos potenciálkülönbséget. A próbadarab deformációjának nagyságát nem mértük, a hajlítást minden alkalommal addig folytattuk, amíg a mérőelektrodon megjelenő feszültség kb. 300 mV nem lett. A mérőelektrodon észlelt feszültség negatív volt. A potenciálkülönbség sötétben egy bizonyos átmeneti idő eltelte után (2–5 perc) közel állandó volt vagy lassan csökkent (az ún. sötétáram). Ezt a sötétáramot a kiértékelésnél korrekcióba vettük. Olyankor kaptunk általában jól reprodukálódó eredményeket, ha ez a sötétáram elhanyagolható volt. Fény hatására az elektrodokon mért feszültség közel exponenciális törvény szerint csökkent:

$$U = U_0 e^{-at} \quad (3.1.1)$$

Ezt a jelenséget mint belső fotovezetést foghatjuk fel, ahol a mérőfeszültséget nem kívülről adtuk a kristályra, hanem a hajlításnál fellépő, a *töltött diszlokációk mozgásából* származó elektromos teret használtuk. A fotovezetést kísérletünkben a kristály



2. ábra. A diszlokációs fotovezetés nagyságának változása (575 nm hullámhosszúságú mérőfény esetén) a megismételt terhelések sorszámanak függvényében, a 19. és 29. terhelés előtt a kristály újra röntgenezve]

megszínezésekor kialakuló *F*-centrumokból a fény hatására szabadabbá váló elektronok adják. (Ezt a módszert, elvileg más fotovezető és más belső elektromos feszültséget adó jelenség vizsgálatánál is lehet használni.)

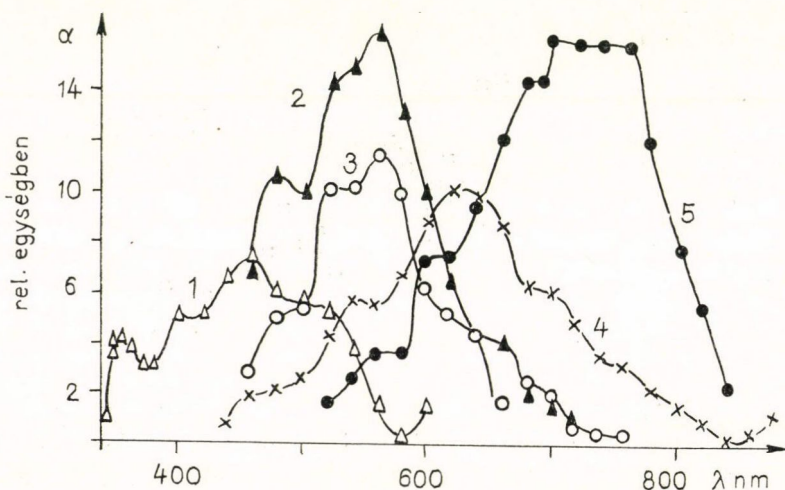
Meg kell jegyezni, hogy a fenti egyszerű összefüggésben (3.1.1) az  $a$  mennyiség, amely jellemzi a belső fotovezetést, a következő tulajdonságokat mutatja:

1. jó közelítéssel arányos a fény intenzitásával ( $I_0$ );
2. értéke a deformáció után kb. 1 perc múlva adott hullámhossz, adott intenzitású fényvel történő megvilágítás esetén bizonyos határokon belül konstans és független attól, hogy közben a próbadarabot esetleg más hullámhosszú fényvel is megvilágítjuk.  $a$  értékeinek ez a reprodukálhatósága tette lehetővé a disszertációban foglalt állítások igazolását.  
A frissen röntgenezett kristályban az első terhelés során  $a$  értéke nagyobb-nak mutatkozott és gyorsabban csökkent; az ismételt deformációk során  $a$  lényegesen stabilabbnak mutatkozott (2. ábra) [203];
3. az  $a$  erősen függ a megvilágító fény hullámhosszától;
4. függ a próbadarabtól;
5. azonos próbadarab esetén is változik a megismételt kísérletek folytán;
6. nem mutat egyértelmű összefüggést a színcentrum koncentrációval.

Az 1—2 tulajdonságokra való tekintettel bevezetünk egy  $\alpha$  értéket a következőképpen:  $a(I_0) = I_0 \cdot \alpha$ .

Az  $\alpha(E)$  mennyiséget, mint a fény fotonenergiájának ( $E$ ) (vagy hullámhosszá-nak) függvényét, tekintettel a mérőfeszültség eredetére, *diszlokációs fotovezetési spektrumnak* nevezzük. Tipikus diszlokációs fotovezetési spektrumokat ábrázol a 3. ábra.

Hangsúlyozni kell, hogy minden valószínűség szerint nagyon bonyolult folyamatok eredőjét mérjük és nagyon sok függ kontrollálhatatlan tényezőktől, a kristály „előéletétől”.



3. ábra. Tipikus diszlokációs fotovezetési spektrumok, 1 — NaCl, 2 — NaBr, 3 — KCl, 4 — KBr, 5 — KI egykristály esetén



A diszlokációs fotovezetési spektrumok ugyanarra a kristályra is gyakran különbözőek. Azt az oldalát igyekeztük megfogni a kísérleteknek, amely törvény-szerűen reprodukálódik.

A diszlokációs fotovezetési spektrumnak két ilyen jellemző tulajdonsága van:

1. emlékeztet az adott alkali-halogenid kristályban kimért  $F$ -sáv abszorpciós spektrumára, csak ahhoz képest jelentős *kiszélesedést* mutat;
2. spektrumában az  $F$ -sávtól eltérően *helyi maximumok*, vállak vannak.

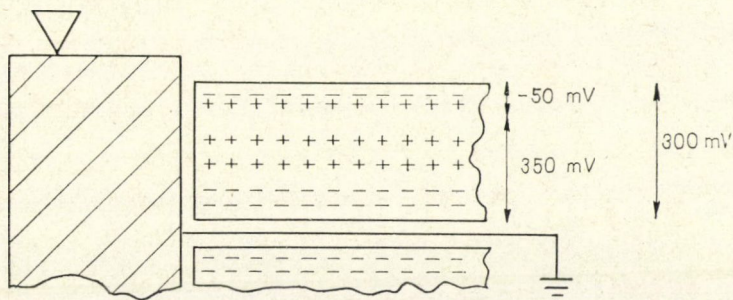
### 3.2. A kísérleti eredmények értelmezése

Whitworth szerint [53] négy pontos hajlításkor a kristályban az elektromos tér a 4. ábrán látható módon alakul ki. A diszlokáció források a felület alatt vannak, Dupuy [57] szerint a kristály vastagságának mintegy  $1/6$ -ában. Ily módon két ellentétes tér alakul ki, és ennek eredőjét mérjük. Az eredő tér és a nagyobbik térrészben a potenciálkülönbség pozitív, a kisebbikben negatív (ellentér).

Az ellentér jelenlétét mutatja az a mérés, amikor csak a felületi réteg lett meg-színezve (deuteron besugárzással), így megvilágításkor a teret csökkentő fotoelektronok csak az „ellentér” tartományában keletkeztek. Mint várható volt, ebben az esetben a mért eredő pozitív elektromos feszültség megnőtt [167].

A bizonyítást elfogadták az irodalomban, de szerzőiben bizonyos fenntartások maradtak, nem magát a kísérletet illetően, hanem a lehetséges mellékeffektusokkal kapcsolatban: csak a felületi réteg deuteronokkal történő erős színezése során a felületi réteg mechanikai tulajdonságai erősen megváltozhattak, ez befolyásolhatja a Whitworth—Dupuy-féle ellentér kialakulását; a felületi réteg erősen szennyezett lesz deutériummal, ez megváltoztathatja az ebben a rétegben levő diszlokációk töltését. A fentiekre való tekintettel a kísérletet megismételtük, oly módon, hogy a csak a felületi rétegben létrehozandó fotovezetést kis behatoló képességű,  $121,55$  nm hullámhosszúságú vákuumultraibolya fény segítségével váltottuk ki szintelen kristályban [168]. Véleményünk szerint ezen kísérlet a Whitworth—Dupuy-féle ellentér létezését egyértelműen bizonyítja.

A fenti kísérletek az ellentér létezésén kívül mutatják továbbá azt a nyilvánvaló tényt, hogy a fotoelektronok mozgását nem az eredő tér, hanem a helyi elektromos térerősségek, jelen esetben az ellentér határozzák meg.

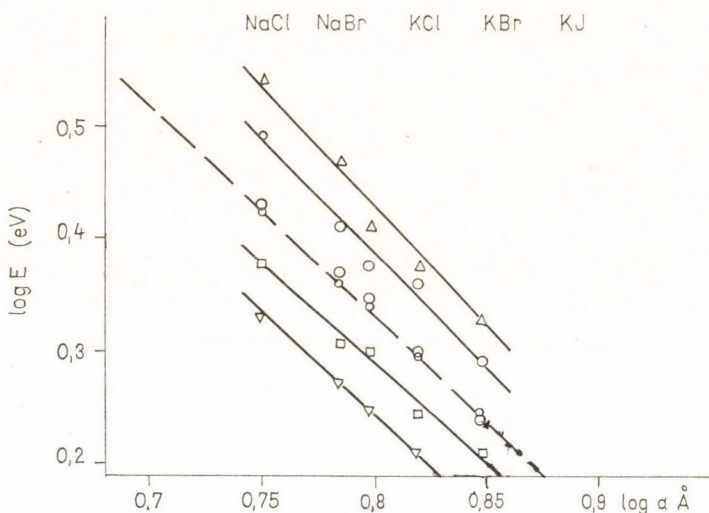


4. ábra. A próbadarabban kialakuló elektromos feszültség  
sematikus ábrázolása



A fenti képből következik, hogy kísérleteinkben a diszlokációk eredő töltése negatív volt, így tudták létrehozni mozgásukkal a fent leírt elektromos potenciálkülönbségeket. Leegyszerűsítve, a következő képet kell elképzelnünk: egyik oldalon a diszlokáció töltött jogjai, másik oldalon a gyakorlatilag helyén maradt Debye—Hückel-felhő, ill. a diszlokáció által mozgása során hátrahagyott töltések dipólokat, „mikrokondenzátorokat” alkotnak. Ezen „mikrokondenzátorok” eredő feszültségét mérjük. Amikor a kristályt fénnel megvilágítjuk, fotoelektronokat hozunk létre, melyek a „mikrokondenzátorok” terében elmozdulnak, majd valahol csapdába esnek. Elmozdulásuk során csökkentik az eredő elektromos teret, mégpedig annál inkább, minél erősebben hatott rájuk a helyi elektromos tér. Mivel a diszlokáció össztöltése negatív, a fotoelektronok többségükben a diszlokációtól mozogtak a „mikrokondenzátor” másik „fegyverzete” felé. Ennek megfelelően elképzelésünk szerint azok a centrumok, melyek az adott kísérletben lényeges fotoelektronokat adják, zömmel a diszlokációk közelében helyezkednek el.

Figyelembe véve, hogy látható fény esetén színezett kristályok adják csak az effektust, valamint azt, hogy az  $F$ -centrum fotovezetési kvantumhatásfoka a többi színcentruménál nagyobb, továbbá azt a tényt, hogy a diszlokációs fotovezetési spektrum a különböző alkali-halogenidekben jól követi az  $F$ -sáv változását a rács-állandó függvényében (5. ábra), azt kell elfogadnunk, hogy a fotoelektronokat



5. ábra. A helyi maximumokhoz tartozó energiaértékek a Mollwo—Ivey-szabálynak megfelelő szokásos kétszer logaritmusos koordináta-rendszerben, a kis körök irodalmi  $F$ -maximum értékek

$F$ -centrumok adják. Mivel más tényezőknek, pl. a fotoelektronok átlagos úthosszának stb. nem indokolt jelentős hullámhossz-függést tulajdonítani, fel kell tételeznünk, hogy a diszlokációs fotovezetési spektrum eltérése az  $F$ -sávától azzal magyarázható, hogy a számunkra fontos  $F$ -centrumok erősen perturbáltak.

Ilyen perturbáció lehet a fenti képpel összhangban a diszlokáció töltött jogjának, vagy mechanikai feszültségterének hatása a diszlokáció közelében levő  $F$ -centrumra.



Természetesen a kristályban folyó folyamatok rendkívül összetettek, mérésünk e nagyon inhomogén folyamatokról egy eredő  $\alpha(E)$ -t ad, és ebből próbálunk következtetéseket levonni a folyamat lényegére. Így pl. a fent leírt  $F$ -elektron mechanizmuson kívül a bevilágítás hatására diszlokációs mozgások is elképzelhetők, amelyek szintén hatással lehetnek a diszlokációs fotovezetési spektrumra.

### 3.3. A „geometriai effektus” hatása a diszlokációs fotovezetési spektrumra

Vizsgáljuk meg, hogyan befolyásolják a kísérletileg meghatározott diszlokációs fotovezetési spektrumot olyan effektusok, mint a mérőfény abszorpciójának különbözősége a különböző hullámhosszakon és a kristály elszíntelenedése.

Egy elegendően kicsi  $\Delta x$  tartományban a fényintenzitás csökkenése

$$\Delta I = -\gamma N(x, t) I(x, t) \Delta x \quad (3.3.1)$$

ahol  $N(x, t)$  az  $F$ -centrum koncentráció,  $I(x, t)$  a fény intenzitása egy adott  $x$  mélységben. Hasonló összefüggést írhatunk fel az  $F$ -centrum koncentráció csökkenésére  $\Delta t$  idő alatt:

$$\Delta N = -\kappa N(x, t) I(x, t) \Delta t \quad (3.3.2)$$

ahol  $\gamma$ , ill.  $\kappa$  az egységnyi koncentrációhoz és intenzitáshoz tartozó intenzitás, ill.  $F$ -centrum koncentráció csökkenés.

A (3.3.1) és (3.3.2) összefüggéseket egy differenciálegyenlet-rendszerként írhatjuk fel:

$$\frac{\partial I(x, t)}{\partial x} = -\gamma N(x, t) I(x, t) \quad (3.3.3)$$

$$\frac{\partial N(x, t)}{\partial t} = -\kappa I(x, t) N(x, t).$$

A (3.3.3) egyenletrendszer megoldása:

$$I(x, t) = \frac{g'(\kappa t)}{g(\kappa t) + f(\gamma x)} \quad (3.3.4)$$

$$N(x, t) = \frac{f'(\gamma x)}{g(\kappa t) + f(\gamma x)},$$

ahol  $g(x)$  és  $f(x)$  legalább egyszer differenciálható tetszőleges függvények, konkrét alakjukat a (3.3.3) egyenletrendszer kezdő és peremfeltételei határozzák meg. Logikus feltenni a következőket:

$$I(0, t) = I_0 = \text{const.} \quad (3.3.5)$$

$$N(x, 0) = N_0 = \text{const.}$$

következésképpen

$$I(x, 0) = I_0 e^{-\gamma N_0 x} \quad (3.3.6)$$

$$N(0, t) = N_0 e^{-\kappa I_0 t}.$$

Behelyettesítve (3.3.5)-t és (3.3.6)-ot a (3.3.4) megoldásba, a következő  $N(x, t)$  és  $I(x, t)$  függvényeket kapjuk:

$$N(x, t) = \frac{N_0 e^{N_0 \gamma x}}{e^{N_0 \gamma x} + e^{I_0 \kappa t} - 1}$$

$$I(x, t) = \frac{I_0 e^{I_0 \kappa t}}{e^{N_0 \gamma x} + e^{I_0 \kappa t} - 1}. \quad (3.3.7)$$

A perturbált tartományban levő, a diszlokációs fotovezetést adó  $F$ -centrumok száma ( $N_d$ ) egy, a (3.3.2) összefüggéshez hasonló összefüggés szerint csökken:

$$\frac{\partial N_d}{\partial t} = -\varrho I(x, t) N_d(x, t), \quad (3.3.8)$$

ahol, tekintettel arra, hogy általában a diszlokációs fotovezetés szempontjából aktív  $F$ -centrumok száma lényegesen kevesebb, mint a kristályban levő összes  $F$ -centrumok száma,  $I(x, t)$ -t a (3.3.8) egyenletben adottnak tekinthetjük (3.3.7) szerint. Megoldva a (3.3.8) egyenletet a következő kifejezést kapjuk:

$$N_d = N_{d0} e^{\frac{N_0 \gamma \varrho}{\kappa} x} [e^{I_0 \kappa t} + e^{N_0 \gamma x} - 1]^{-\frac{\varrho}{x}}. \quad (3.3.9)$$

Legyen  $b_0(E, x)$  a diszlokációs fotovezetés szempontjából aktív  $F$ -centrum egységnyi koncentrációjához tartozó, egységnyi intenzitás hatása a diszlokációs fotovezetésre „végtelen vékony” rétegben (ahol a fény abszorpciójától eltekinthetünk).

A  $b_0(E, x)$   $x$ -től való függése figyelembe veszi a diszlokációs fotovezetés szempontjából érdekes diszlokációk esetleges nem egyenletes eloszlását a kristályban.

Akkor az  $x$  mélységben levő,  $dx$  vastagságú réteg hatása (dB): (6.a ábra)

$$dB = dx N_d \cdot b_0(E, x) I(x, t, E) \quad (3.3.10)$$

és a hatás ( $B$ ) az egész kristályban:

$$B(E, x_0, t) = \int_0^{x_0} N_d(x, t) I(x, t) b_0(E, x) dx. \quad (3.3.11)$$

Amennyiben a  $b_0(E, x)$ -ben az  $x$  függéstől eltekinthetünk (egyenletes diszlokációs téreloszlás) a következőt kapjuk:

$$B(E, x_0, t) = b_0(E) I_0 N_{d0} \cdot \frac{\kappa}{N_0 \gamma \varrho} \cdot \frac{e^{I_0 \kappa t}}{I_0 \kappa t - 1} \times$$

$$\times \left\{ e^{\frac{N_0 \gamma \varrho}{\kappa} x_0} [e^{N_0 \gamma x_0} + e^{I_0 \kappa t} - 1]^{-\frac{\varrho}{x_0}} - e^{-I_0 \varrho t} \right\}. \quad (3.3.12)$$

A végtelen vékony kristályban az  $I_0$  intenzitás hatása a diszlokációs fotovezetési spektrumra:

$$b(E, t) = \frac{\partial B}{\partial x_0} \Big|_{x_0=0} = I_0 N_{d0} b_0(E) e^{-I_0 \varrho t}. \quad (3.3.13)$$



A (3.3.11) összefüggésre tekintettel egy korrekciós faktort ( $\chi(E)$ ) vezethetünk be, amelyek a vastag kristályban kimért diszlokációs fotovezetési spektrumból ( $g$  vastag) végtelen vékony kristályhoz tartozó spektrumot ( $g$  vékony) ad:

$$g_{\text{vékony}} = \chi(E) g_{\text{vastag}} \quad (3.3.14)$$

$$\chi(E) = \frac{b(E, t) x_0}{B(E, x_0, t)}.$$

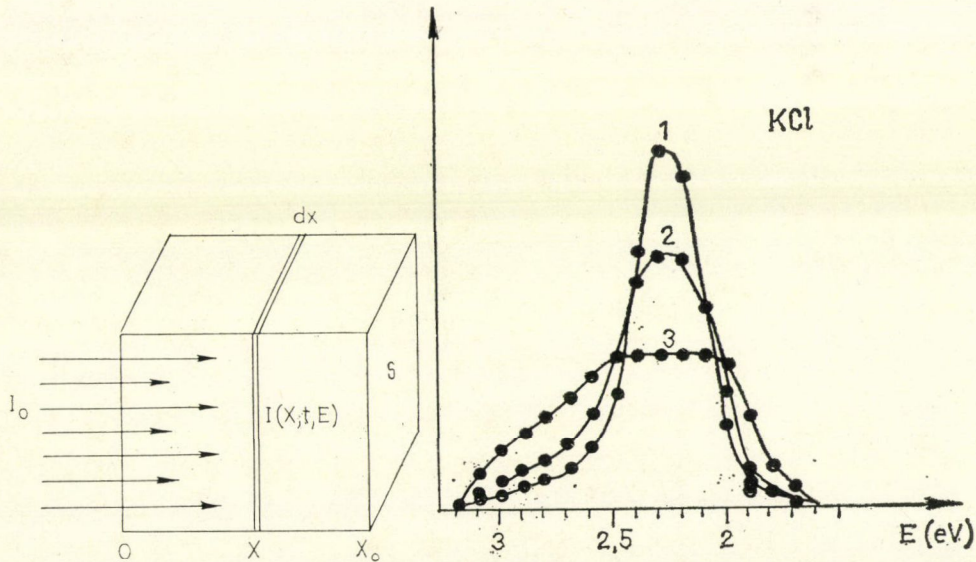
Ha a színcentrum koncentráció csökkenéstől eltekintünk, és a kristályt egyenletesen megszínezettnek tételezzük fel ( $N(x, t) \equiv N_0$ ), a  $\chi(E)$  korrekciós faktor lényegesen egyszerűbb alakot ölt:

$$\chi_0(E) = \frac{x_0 a(E)}{1 - e^{-x_0 a(E)}}, \quad (3.3.15)$$

ahol  $a(E)$  a kristály abszorpciós spektruma  $a(E) = N_0 \cdot \gamma(E)$ .

A 6b) ábra mutatja, hogyan változtatja meg a spektrumot egyedül a geometriai effektus, (3.3.14) és (3.3.15) alapján számolva.

Amennyiben a geometriai effektuson kívül figyelembe vesszük a spektrum kiszélesedését a diszlokáció hatására, úgy erősen színezett, vastag kristályoknál a számítások határozott kétpúpú görbét adnak, egy mély völgygel az  $F$ -maximum helyén. Ilyen jellegű diszlokációs fotovezetési spektrumokat a valóságban is megfigyeltünk vastag és additíve színezett próbadarabokon (Mátrai Mária mérései).



6. ábra. a) A geometriai effektus tárgyalásával alkalmazott jelölések. b) Számolt diszlokációs fotovezetési spektrum, amelyekben csak a geometriai effektus játszik szerepet,  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$   $F$ -centrum koncentráció esetén. 1 görbe  $F$ -sáv (végtelen vékony próbadarab), 2 görbe 1 mm vastag próbadarab, 3 görbe 5 mm-es próbadarab

Meg kell jegyezni, hogy a (3.3.12) összefüggés levezetésénél felhasznált feltételezés, hogy  $b_0(E, x)$  nem függ  $x$ -től, vagyis hogy a diszlokációs fotovezetési spektrum szempontjából érdekes diszlokációs tér egyenletes eloszlást mutat, csak a geometriai effektus okozta hatás kvalitatív leírására alkalmas. Valójában a Whithworth—Dupuy-féle ellentér jelenléte folytán a  $b_0(E, x)$  bonyolultan függ  $x$ -től, valószínűleg még előjelet is vált (az ellentér hatása), pontos menetére nincsenek megbízható adataink.  $b_0(E, x)$  előjel váltása vastag, erősen színes kristálynál lényeges különbséget okoz a diszlokációs fotovezetési spektrumban attól függően, hogy a kristályt a semleges réteg, vagy az ellentér tartomány felől világítjuk meg [169]. A fentiekre tekintettel igyekeztünk vékony (0,5—1,5 mm) és gyengén színezett ( $10^{15}$ — $10^{16}$  F-centrum/cm<sup>3</sup>) próbadarabokkal dolgozni. Ebben az esetben a geometriai effektus gyakorlatilag elhanyagolható.

### 3.4. A kísérleti eredményekből levont következtetések

Nézzük meg, hogy a 3.2. pontban kialakított képnek megfelelően a kísérleti adatokból milyen következtetéseket vonhatunk le.

Ismeretes, hogy külső elektromos tér kvadratikusan Stark-effektust hoz létre az  $F$ -centrumon, amely az  $F$  sáv kiszélesedésével jár [136—138]. Az a tény, hogy ionkristályokat vizsgálunk és az, hogy az éldiszlokációk elektromosan töltöttek, azt a feltételezést sugallja, hogy esetünkben is Stark-effektus okozza a spektrum kiszélesedését [170—173]. A 2.2. pontban tárgyalt momentumok módszerével ez a kiszélesedés jól vizsgálható [135]. Homogén elektromos tér nem változtatja meg az  $F$ -sáv nulladik és első momentumát ( $M_1$ ), a második momentum ( $S_2$ ) megváltozása pedig arányos az elektromos térerősség ( $F$ ) négyzetével.

$$\Delta S_2 \sim F^2. \quad (3.4.1)$$

Egy közelítő összefüggés írható fel a második momentum megváltozása és az  $F$ -sáv maximumának megváltozása ( $\Delta\alpha$ ) között:

$$\frac{\Delta S_2}{2S_2} \cong -\frac{\Delta\alpha}{\alpha} \quad \text{vagyis} \quad \frac{\Delta\alpha}{\alpha} \sim F^2 \quad (3.4.2)$$

amely tovább egyszerűsíti a kiértékelést. Chiarotti, Grassano és társai [136, 138], valamint Rhyner és Cameron [137] kísérletileg igazolták ezt az összefüggést.

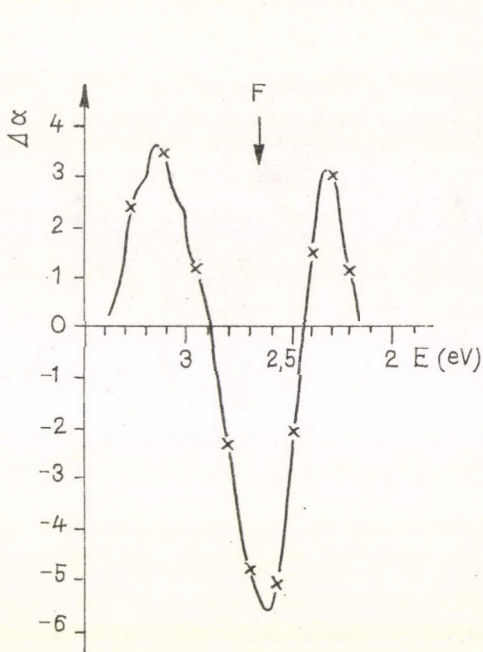
Feltételezzük, hogy esetünkben szintén Stark-effektusból származik a kiszélesedés. A momentumok módszerének elmélete szerint a nulladik momentum nem változik, így a  $g(E)$  és a  $f(E)$  görbéket az

$$\int g(E) dE = \int f(E) dE$$

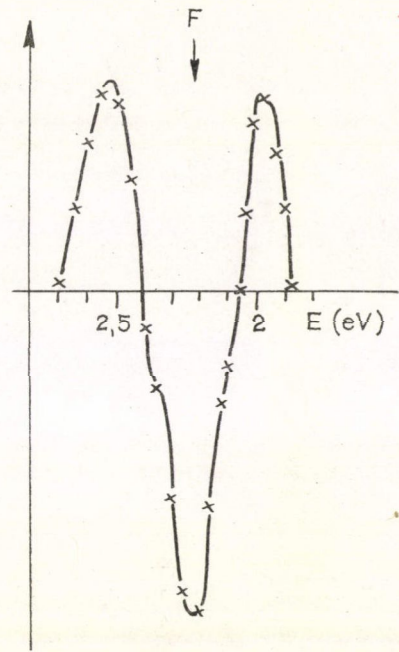
feltétel mellett illeszteni tudjuk egymáshoz, és előállíthatjuk a  $\Delta\alpha(E) = g(E) - f(E)$  különbségi görbét (7—13. ábrák.)

Megjegyezzük, hogy ezek a görbék hasonlítanak a külső elektromos térrel kimért Stark-effektus különbségi görbéire (14. ábra). A külső és belső Stark-effektusok összehasonlításánál tekintettel kell lennünk arra, hogy a mérések a két esetben külön-

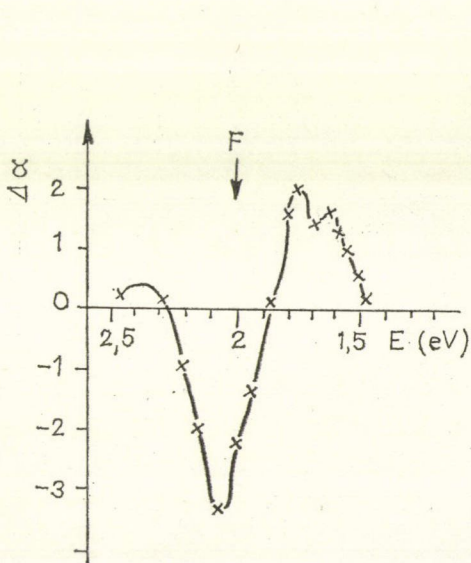




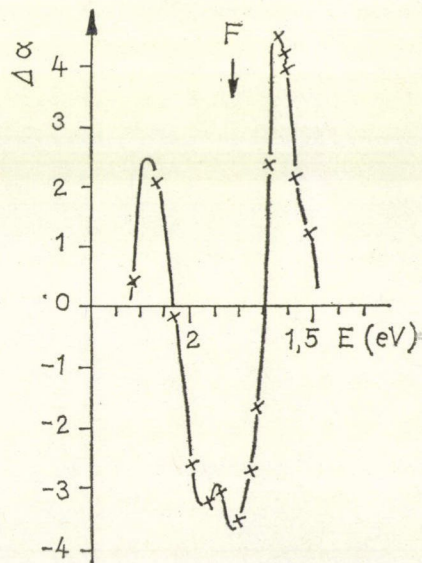
7. ábra.  $\Delta\alpha = g(E) - f(E)$  különbségi görbe NaCl kristály esetén



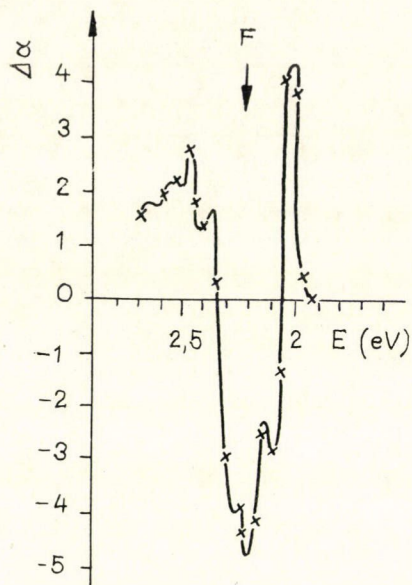
8. ábra.  $\Delta\alpha = g(E) - f(E)$  különbségi görbe KCl kristály esetén



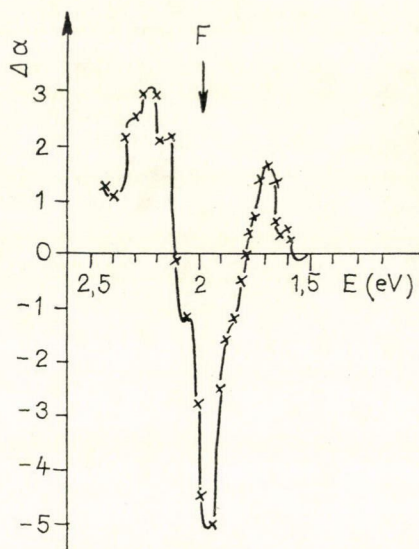
9. ábra.  $\Delta\alpha = g(E) - f(E)$  különbségi görbe KBr kristály esetén



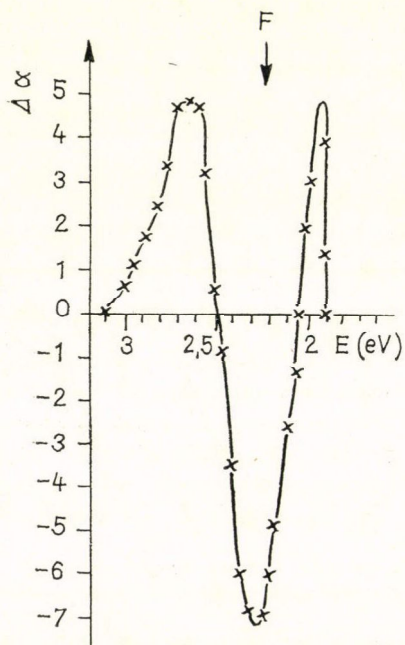
10. ábra.  $\Delta\alpha = g(E) - f(E)$  különbségi görbe KI kristály esetén



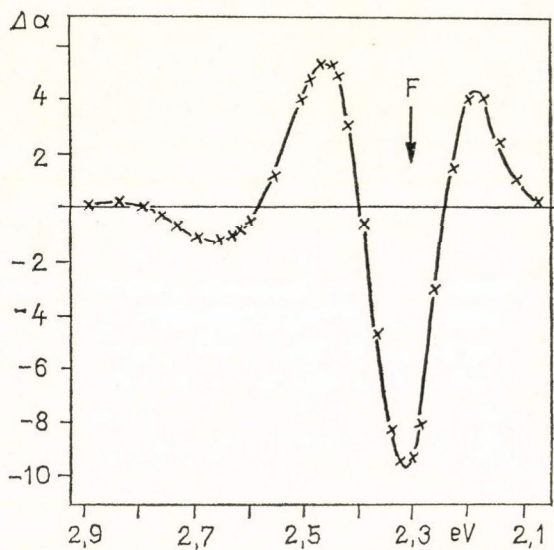
11. ábra.  $\Delta\alpha = g(E) - f(E)$  különbségi görbe extrém tiszta OH-mentes KCl kristály esetén



12. ábra.  $\Delta\alpha = g(E) - f(E)$  különbségi görbe extrém tiszta OH-mentes KBr kristály esetén



13. ábra.  $\Delta\alpha = g(E) - f(E)$  különbségi görbe additive színezett KCl kristály esetén



14. ábra. Külső Stark-effektussal kimért különbségi görbe KCl kristály esetén [138]



böző hőmérsékleten történtek. A (3.4.2) összefüggés alapján, figyelembe véve, hogy  $\Delta S_2$  nem függ a hőmérséklettől [135]:

$$\frac{\left(\frac{\Delta\alpha}{\alpha}\right)_{T_1}}{\left(\frac{\Delta\alpha}{\alpha}\right)_{T_2}} = \frac{(S_2)_{T_2}}{(S_2)_{T_1}} \quad (3.4.3)$$

Extrapolálva a külső elektromos térrel kimért  $\frac{\Delta\alpha}{\alpha}(F^2)$  függvényt, nagyobb  $F$  elektromos térerősség értékekre, megbecsülhetjük az esetünkben szereplő effektív térerősséget. Mivel a kapott értékeinket csak durva közelítésnek tekintettük, a [171—173] közleményekben a (3.4.3) figyelembevétele nélkül a (3.4.2)-ből számított  $F$  értékeket közöltük (1. táblázat).

Egy és ugyanazon próbadarabon kimért lokális tér értékek kb. 8 százalékos szórást mutattak KCl esetén. Ugyanazon alkalihalogenid különböző próbadarabján végzett mérésekből számított  $F$  értékek egymástól való eltérése 20%-on belül volt, ez extrém tiszta, OH-mentes, valamint additíve színezett kristályokra is igaznak bizonyult (7—13. ábrák).

A diszlokációs fotovezetési spektrum alakjának kialakításában szereplő másik valószínű tényező a diszlokáció mechanikus feszültségtére. A további diszkusszió céljából tekintsük az 5. ábrát, amelyen a diszlokációs fotovezetési spektrum helyi maximumainak megfelelő fotonenergiákat a rácsparaméter függvényében log-log koordináta-rendszerben tüntettük fel.

A Mollwo—Ivey-szabály szerint [174, 175],

$$E = Aa^{-n} \quad (3.4.5)$$

#### 1. TÁBLÁZAT

A diszlokációs fotovezetési spektrum kiszélesedéséből becsült elektromos térerősség értékek ( $F$ ) V/nm-ben.

	NaCl	KCl	KBr	KI
$\frac{\Delta\alpha}{\alpha}$	0,367	0,381	0,359	0,242
$F$	1,05	0,5	1,1	0,52

ahol  $E$  az  $F$  sáv maximumához tartozó eV-ban mért fotonenergia számértéke,  $a$  az Å-ben megadott rácsparaméter mértékszáma,  $n \sim 1,84$ , Å egy konstans. Amint az ábrából látható, a diszlokációs fotovezetési spektrum megfelelő maximumaihoz tartozó fotonenergiák a különböző kristályok esetében jó közelítéssel egy-egy egyenesen fekszenek, vagyis egy, a fenti kifejezéshez hasonló összefüggéssel írhatók le. Ez a körülmény arra utal, hogy a maximumok a különböző alkalihalogenid kristályokban hasonló módon perturbált  $F$ -centrumokból származnak.

J. S. Jacobs az egyes alkalihalogenid kristályokat hidrosztatikai nyomásnak vetette alá és azt tapasztalta, hogy ekkor a (3.4.5) képlethez hasonló összefüggés írja le az  $F$  sáv maximumának rácsállandó függését, azonban a képletben szereplő  $n$  értéke kb. kétszeresére nő [176]. Ezt a változást már maga Jacobs, majd később Buchenbauer és Fitchen [177] az  $F$ -centrum környezetének az ép kristályhoz viszonyított nagyobb összenyomhatóságával magyarázták, és szerintük, ha az  $F$ -centrumhoz tartozó tényleges iontávolságokat vennénk alapul, az  $n$  értéke továbbra is 1,84 körül lenne. Felhasználva ezt a gondolatot és eltekintve a nyomásviszonyoknak esetünkben fellépő inhomogenitásától, a diszlokációs fotovezetési spektrum helyi



## 2. TÁBLÁZAT

Iontávolságok a diszlokációs fotovezetési spektrum alapján számolva Å-ban

NaCl	NaBr	KCl	KBr	KI
2,41	2,67	2,85	2,98	3,17
2,59	2,85	2,98	3,05	3,31
2,81*	3,05	3,14*	3,29*	3,53*
2,98	3,25	3,28	3,4	3,68
3,05	3,4	3,53	3,53	

\* Irodalmi értékek

maximumához tartozó rácestávolságok a fenti képletből, ill. az 5. ábrán feltüntetett irodalmi Mollwo—Ivey-egyenesből megbecsülhetők [198]. Ezeket a nyilván csak erősen közelítő értékeket tartalmazza a 2. táblázat. Véleményünk szerint feltehető, hogy a diszlokációs fotovezetési spektrumban a perturbálatlan állapotnak megfelelő  $F$ -maximumtól a rövid hullámhosszak felé eső helyi maximumok a diszlokáció környezetének kompressziós, a hosszú hullámhosszak felé esők pedig a dilatációs részében levő  $F$ -centrumokhoz tartoznak. Megjegyezzük a következőket:

1. A NaBr diszlokációs fotovezetési spektrumában és optikai elnyelési színképében az  $F$ -maximum helye nem esik rá a megfelelő Mollwo—Ivey-egyenesre. Ez csak akkor következik be, ha 2,98 Å iontávolság helyett 3,05 Å értéket veszünk. Ugyanez áll a helyi maximumokra is. Hasonló gondolatmenettel illesztette Van Doorn a „dobozba zárt részecske” (particle-in-a-box) modellt a Mollwo—Ivey-összefüggéssel [178].
2. A diszlokáció környezetének dilatált tartományára vonatkozó adatokat különösen érdekesnek tartjuk, mert ezekre összenyomási kísérletekből nyilván nem lehet következtetni.

A kapott értékeket (1. és 2. táblázatok) óvatosan kell kezelnünk a következők miatt:

1. Csak átlagértékeket kaptunk, amiket több ismeretlen tényező befolyásol:
  - a) az eloszlások inhomogenitása,
  - b) a mérésben van egy ismeretlen faktor, az adott fotoelektron tércsökkentő ereje,
  - c) a fent említett „ellentér” jelenléte stb.
2. Tekintettel kell lenni arra, hogy a mérés során mind az elektromos tér, mind a diszlokáció mechanikus tere egyidejűleg van jelen és a két hatás eredőjét mérjük.

A 3.5. és 3.6. fejezetben egy elméleti számítást írunk le, amelynek során kísérlet történik a deformációs tér és a töltött jog Coulomb-tere hatásának összehasonlítására.

### 3.5. A diszlokáció jog Coulomb-terének hatása az $F$ -centrumra

A kialakított képnek megfelelően megnézzük, hogyan hat az  $F$ -centrum abszorpciós spektrumának vonalalakjára (a továbbiakban  $F$ -vonalalak) a töltött jog elektromos tere [202]. A töltött jogot elegendően távolról mint ponttöltést észleljük

$e' \sim \frac{e}{2}$  effektív töltéssel. A hozzátartozó perturbációs Hamilton-operátor a követ-



kező lesz:

$$H''_1 = \frac{ee'}{\varepsilon R^3} (\vec{r}\vec{R}) - \frac{ee'}{2\varepsilon R^5} [3(\vec{r}\vec{R})^2 - r^2 R^2]$$

$$H'' = H''_1 + H''_2; \quad H''_1 = \frac{ee'}{\varepsilon R^3} (\vec{r}\vec{R}), \quad (3.5.1)$$

ahol  $R$  az  $F$ -centrum súlypontjának helyvektora a joghoz viszonyítva,  $r$  az  $F$ -centrum elektronjának helykoordinátája az  $F$ -centrum középpontjára vonatkoztatva.

A 2.2. pontban részletezett momentumok módszere szerint az  $F$ -vonalalak momentumainak változására a következőket kapjuk:

$$\Delta M_0 = 0$$

$$\Delta M_1 = \langle \vec{\eta} 2\vec{p} | H'' | \vec{\eta} 2\vec{p} \rangle - \langle 1s | H'' | 1s \rangle, \quad (3.5.2)$$

ahol  $\vec{\eta}$  a fény polarizációs vektora,  $2p_\xi$  ( $\xi = x, y, z$ ) pedig az  $F$ -centrum első gerjesztett állapotai.

Mivel szimmetria okokból

$$\langle 2p_\xi | H''_1 | 2p_\xi \rangle = \langle 1s | H''_1 | 1s \rangle = \langle 1s | H''_2 | 1s \rangle = 0$$

$$\Delta M_1 = \langle \vec{\eta} 2\vec{p} | H''_2 | \vec{\eta} 2\vec{p} \rangle. \quad (3.5.3)$$

Kiszámítjuk a megfelelő mátrixelemeket

$$\langle 2p_x | H''_2 | 2p_y \rangle = -\frac{3}{4} \frac{ee'}{\varepsilon R^5} R_x R_y \langle 2p_x | r^2 | 2p_x \rangle$$

$$\langle 2p_x | H''_2 | 2p_x \rangle = -\frac{ee'}{5\varepsilon R^5} (3R_x^2 - R^2) \langle 2p_x | r^2 | 2p_x \rangle. \quad (3.5.4)$$

Behelyettesítve (3.5.2) egyenletbe:

$$\Delta M_1 = -\frac{ee'}{\varepsilon R^5} \left[ \frac{1}{5} \sum_i (3|\eta_i|^2 - 1) R_i^2 + \frac{3}{4} \sum_{i \neq j} \eta_i^* \eta_j R_i R_j \right] \langle 2p_x | r^2 | 2p_x \rangle. \quad (3.5.5)$$

A második momentum változása az  $F$ -vonalalak perturbálatlan első momentumára vonatkoztatva a (2.2.27) szerint, figyelembe véve, hogy  $H'$  nem hat a spinhullám-függvényre, a (3.5.3) összefüggéshez hasonlóan:

$$\Delta S_2 = \Delta S_2^{(1)} + \Delta S_2^{(2)} \quad (3.5.6)$$

ahol

$$\Delta S_2^{(1)} = \langle \vec{\eta} 2\vec{p} | H''_1 | 2s \rangle \langle 2s | H''_1 | \vec{\eta} 2\vec{p} \rangle$$

$$\Delta S_2^{(2)} = \sum_\xi \langle \vec{\eta} 2\vec{p} | H''_2 | 2p_\xi \rangle \langle 2p_\xi | H''_2 | \vec{\eta} 2\vec{p} \rangle \quad (3.5.7)$$

$\xi$  az összegezésnél  $x, y, z$  értékeket vesz fel. Behelyettesítve (3.5.1) kifejezést a (3.5.7) összefüggésbe:

$$\Delta S_2^{(1)} = \frac{e^2 e'^2}{\varepsilon^2 R^6} |\vec{\eta}\vec{R}|^2 |\langle 2p_x | x | 2s \rangle|^2 \quad (3.5.8)$$

Hasonlóképpen, felhasználva a (3.5.1) és (3.5.4) egyenleteket:

$$\begin{aligned} \Delta S_2^{(2)} &= |\langle 2p_x | r^2 | 2p_x \rangle|^2 \left( \frac{ee'}{2\epsilon R^5} \right)^2 \times \\ &\times \left[ \frac{1}{25} \sum_i |\eta_{ii}|^2 (3R_i^2 - R^2)^2 + \frac{9}{16} \sum_{\substack{i \neq j \\ i \neq k}} R_i^2 R_j R_k \eta_j^* \eta_k + \frac{3}{10} \sum_{i \neq j} R_i R_j (3R_i^2 - R^2) \operatorname{Re}(\eta_i^* \eta_j) \right]. \end{aligned} \quad (3.5.9)$$

Ha megbecsüljük a  $\langle 2p_x | r^2 | 2p_x \rangle$  mátrixelemet az irodalomban közölt közelítő  $F$ -centrum hullámfüggvények felhasználásával (pl. [179] alapján NaCl esetén  $\langle 2p_x | r^2 | 2p_x \rangle \cong 1,19 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$ ),  $\Delta M_1$ -re elég kicsi értékeket kapunk, amelyek a kísérletekben a diszlokációs fotovezetési spektrumban talált helyi maximumokat nem értelmezik.

### 3.6. A diszlokáció mechanikai feszültségterének hatása az $F$ -centrumra

Vizsgáljuk meg, hogy a másik perturbáló hatás, a diszlokáció mechanikus feszültsége milyen változást okoz az  $F$ -centrum vonalalakjában [201, 202]. Az  $F$ -centrum és az  $\epsilon_{ij}$  deformációs tenzorral jellemzett mechanikai tér kölcsönhatását lineáris közelítésben egy

$$H'' = \sum_{\Gamma\gamma} h_{\Gamma\gamma}(\vec{r}) \epsilon_{\Gamma\gamma}. \quad (3.6.1)$$

Hamilton-operátor tag írja le, ahol  $\epsilon_{\Gamma\gamma}$  az  $\epsilon_{ij}$  deformációs tenzor komponenseiből a köbös szimmetria irreducibilis reprezentációinak megfelelően komponált mennyiség,  $\Gamma$  index jelöli az adott reprezentációt,  $\gamma$  egy adott reprezentációban a megfelelő bázisfüggvényt jelöli,  $h_{\Gamma\gamma}(\vec{r})$ -ek csatolási tényezők, amelyek ugyanúgy függenek az  $F$  elektron helykoordinátájától ( $r$ ), mint a megfelelő  $\Gamma, \gamma$  bázisfüggvények. Meg kell jegyezni, hogy az  $\epsilon_{\Gamma\gamma}$  és a megfelelő  $\sigma_{\Gamma\gamma}$  közötti összefüggés az  $\epsilon_{ij} = S_{ijkl} \sigma_{kl}$  alapján:

$$\epsilon_{\Gamma\gamma} = s_{\Gamma} \sigma_{\Gamma\gamma}, \quad (3.6.2)$$

ahol  $s_{\Gamma}$ -ra a következőket kapjuk:

$$\begin{aligned} s_{\Gamma_1} &= S_{11} + 2S_{12} \\ s_{\Gamma_3} &= S_{11} - S_{12} \\ s_{\Gamma_5} &= S_{44}. \end{aligned} \quad (3.6.3)$$

A 2.2. pont szerint a  $H''$  perturbáció okozta  $F$  vonalalakváltozást a következő momentum változásokkal írhatjuk le:

$$\begin{aligned} \Delta \tilde{M}_0 &= 0 \\ \Delta M_1 &= \langle \vec{\eta} 2\vec{p} | H'' - \langle 1s | H'' | 1s \rangle | \vec{\eta} 2\vec{p} \rangle \\ \Delta S_2^{(f)} &= \sum_{\xi} \langle \vec{\eta} 2\vec{p} | H'' - \langle 1s | H'' | 1s \rangle | 2p_{\xi} \rangle \langle 2p_{\xi} | H'' - \langle 1s | H'' | 1s \rangle | \vec{\eta} 2\vec{p} \rangle \\ \Delta S_2^{(g)} &= \Delta S_2^{(f)} - (\Delta M_1)^2, \end{aligned} \quad (3.6.4)$$



ahol  $\xi = x, y, z$ ,  $\vec{\eta}$  a fény polarizációs vektora. A fenti kifejezések kiszámításához szükségünk lesz a

$$\langle 2p_\xi | H'' | -\langle 1s | H'' | 1s \rangle | 2p_{\xi'} \rangle$$

mátrixelemekre.

Feltételezve, hogy a deformáció változása az  $F$ -centrum tartományában elhanyagolható, és figyelembe véve a (3.6.1), (3.6.2) és (3.6.3) összefüggéseket, nyilvánvaló szimmetria-megfontolásokból (köbös kristályról lévén szó), a következőket kapjuk:

$$\begin{aligned} \langle 2p_x | H'' | -\langle 1s | H'' | 1s \rangle | 2p_x \rangle &= \alpha \sigma_{xx} + \beta \sigma_{yy} + \beta \sigma_{zz} \\ \langle 2p_y | H'' | -\langle 1s | H'' | 1s \rangle | 2p_y \rangle &= \beta \sigma_{xx} + \alpha \sigma_{yy} + \beta \sigma_{zz} \end{aligned} \quad (3.6.5)$$

valamint

$$\langle 2p_z | H'' | -\langle 1s | H'' | 1s \rangle | 2p_z \rangle = \beta \sigma_{xx} + \beta \sigma_{yy} + \alpha \sigma_{zz}$$

$$\langle 2p_x | H'' | -\langle 1s | H'' | 1s \rangle | 2p_y \rangle = \gamma \sigma_{xy}, \quad (3.6.6)$$

ahol  $\alpha, \beta, \gamma$  később meghatározandó konstansok. Innen az első momentum megváltozása:

$$\Delta M_1 = \sum_{\xi} \sigma_{\xi} [(\alpha - \beta) |\eta_{\xi}|^2 + \beta] + \gamma \sum_{\xi \xi'} \eta_{\xi}^* \eta_{\xi'} \tau_{\xi \xi'}, \quad (3.6.7)$$

ahol  $\xi, \xi' = x, y, z$ ,  $\sigma_{\xi}$  és  $\tau_{\xi \xi'}$  a  $\sigma_{ij}$  feszültségtenzor diagonális, ill. nemdiagonális komponenseit jelöli.

Mint a [135] munkában,  $\Delta M_1$  kifejezést összehasonlítva három független,  $F$ -centrumon elvégzett méréssel (hidrosztatikus nyomás [176] és egytengelyű összenyomások [001] és [110] irányokban [180, 181]),  $\alpha, \beta, \gamma$  konstansok a (3.6.5) és (3.6.6) kifejezésben meghatározhatók a [182]-ben táblázatba foglalt  $A_1, A_3, A_5$  konstansok segítségével

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{A_1 + 2A_3}{3} \\ \beta &= \frac{A_1 - A_3}{3} \\ \gamma &= A_5. \end{aligned} \quad (3.6.8)$$

A második momentum megváltozását az eredeti első momentumra vonatkoztatva megkapjuk, ha a (3.6.4)-ba behelyettesítjük a (3.6.5) és (3.6.6)-ban megadott mátrixelemeket:

$$\begin{aligned} \Delta S_2^{(f)} &= \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j \{ \beta [(\alpha - \beta) (|\eta_i|^2 + |\eta_j|^2) + \beta] + \delta_{ij} (\alpha - \beta)^2 |\eta_i|^2 \} + \\ &+ \gamma \sum_{ijk} \eta_i^* \eta_k \{ \gamma \tau_{ij} \tau_{jk} + \sigma_j \tau_{ik} [2\beta + (\alpha - \beta) (\delta_{ij} + \delta_{kj})] \}. \end{aligned} \quad (3.6.9)$$

A  $\Delta M_1$ , ill.  $\Delta S_2$  konkretizálásához szükségünk lesz a diszlokáció környezetében a  $\sigma_{ij}$  feszültségtenzorra. Mivel a diszlokáció közelében vett  $\sigma_{ij}$  feszültségtenzorra van szükségünk, egy olyan elmélet alapján kellene azt számolnunk, amely

## 3. TÁBLÁZAT

A mechanikus feszültségtér okozta momentumváltozás kiszámításához szükséges  $\alpha, \beta, \gamma$  konstansok értékei  $\frac{\text{eV}}{\text{din/cm}^2}$  egységekben

	NaCl	KCl	KBr	KI
$\alpha$	$-7,34 \cdot 10^{-12}$	$-8,77 \cdot 10^{-12}$	$-7,95 \cdot 10^{-12}$	$-1,030 \cdot 10^{-11}$
$\beta$	$-4,89 \cdot 10^{-12}$	$-2,55 \cdot 10^{-12}$	$-3,47 \cdot 10^{-12}$	$-3,87 \cdot 10^{-12}$
$\gamma$	$-6,8 \cdot 10^{-12}$	$-9,0 \cdot 10^{-12}$	$-6,4 \cdot 10^{-12}$	$-1,0 \cdot 10^{-11}$

figyelembe veszi a diszlokációmag nemlineáris tulajdonságait, atomisztikus szerkezetét. Anizotrop kristály esetén a feszültségtenzort lineáris közelítésben sem lehet analitikusan megadni, mert a probléma vizsgálatához egy hatodfokú egyenletet kellene megoldani [183]. Egyszerűbb esetben azonban léteznek megoldások, köbös kristályok esetén Chou számításaira [184] támaszkodva a következő kifejezéseket kapjuk NaCl típusú kristályokban tipikus éldiszlokációkra (a Burgers-vektor  $[1\bar{1}0]$ , a diszlokáció  $[001]$  irányítottágú):

$$\begin{aligned}\sigma'_{xx} &= -\frac{Kb}{2\pi r} \frac{y[(3-4H)x^2+y^2]}{(x^2+y^2)^2-4Hx^2y^2} \\ \sigma'_{xy} &= \frac{Kb}{2\pi r} \frac{x(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2-4Hx^2y^2} \\ \sigma'_{yy} &= \frac{Kb}{2\pi r} \frac{y(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2-4Hx^2y^2}\end{aligned}\quad (3.6.10)$$

$$\sigma'_{zz} = n(\sigma'_{xx} + \sigma'_{yy}),$$

ahol

$$K = (c_{11} + c_{12}) \left[ \frac{c_{44}(c_{11} - c_{12})}{c_{11}(c_{11} + c_{12} + 2c_{44})} \right]^{1/2}$$

$$H = \frac{(c_{11} + c_{12})(c_{11} - c_{12} - 2c_{44})}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + c_{12} + 2c_{44})}$$

$$n = \frac{c_{12}}{c_{11} + c_{12}} \quad (3.6.11)$$

és  $C_{ij}$  a szokásos rugalmassági állandók, melyeknek értéke táblázatban megtalálható [185]. A fenti  $K, H, n$  értékeket a minket érintő alkali-halogenid kristályok esetére összefoglaltuk a 4. táblázatban.



Figyelembe kell vennünk, hogy a  $\sigma'_{ij}$  tenzor egy olyan koordináta-rendszerben van megadva, mely a diszlokációhoz kötődik (15. ábra). Ugyanakkor  $\alpha, \beta, \gamma$  konstansaink olyan  $\sigma_{ij}$  tenzorhoz tartoznak, amely az alkali-halogenid kristály fő kristály-tani tengelyeinek megfelelő koordináta-rendszerben van megadva.

Legyen éldiszlokációnk Burgers-vektora  $\vec{b} = \frac{a}{2} \cdot [1\bar{1}0]$  és tengelye  $[001]$  mentén, ekkor a

$$T_{ij} = \sum_{kl} a_{ik} a_{jl} T_{kl} \quad (3.6.12)$$

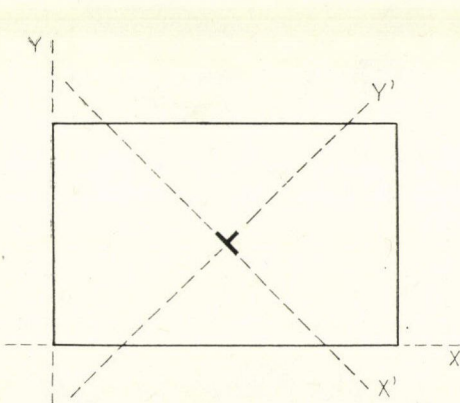
szerint a (3.6.10) kifejezés helyett az  $e_x = [100]$ ,  $e_y = [010]$ ,  $e_z = [001]$  egységvektor által meghatározott koordináta-rendszerben a

$$\sigma_{xx} = \frac{\sigma'_{xx} + \sigma'_{yy}}{2} + \sigma'_{xy}$$

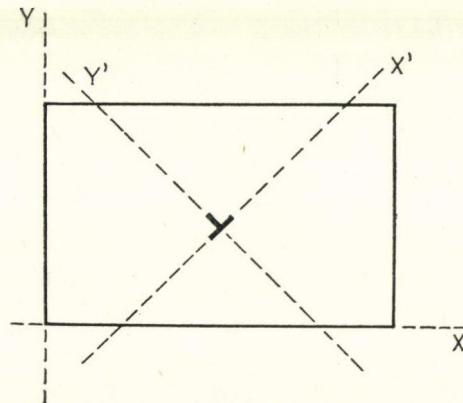
$$\sigma_{yy} = \frac{\sigma'_{xx} + \sigma'_{yy}}{2} - \sigma'_{xy}$$

$$\sigma_{xy} = \frac{\sigma'_{yy} - \sigma'_{xx}}{2} \quad (3.6.13)$$

$$\sigma_{zz} = \sigma'_{zz}$$



15a) ábra.



15b) ábra.

A diszlokációhoz kötött  $\sigma'_{ij}$  koordináta-rendszere, 15.a:  $\vec{b} \parallel [0\bar{1}1]$ , 15.b:  $\vec{b} \parallel [011]$

#### 4. TÁBLÁZAT

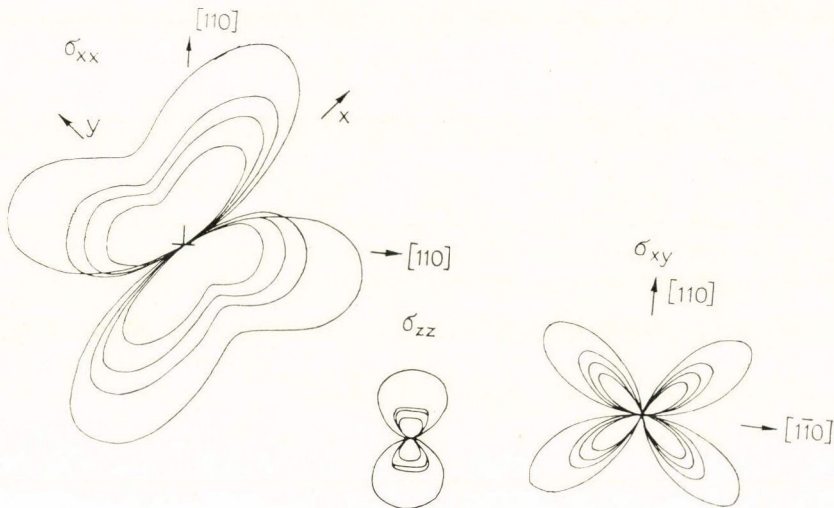
A  $\sigma_{ij}$  feszültségtenzor számolásához szükséges  $K, H, n$  anizotrop konstansok,  $K$  értéke  $\text{din/cm}^2$ -ben,  $H$  és  $n$  dimenzió nélküliek

	$K$	$H$	$n$
NaCl	$2,02 \cdot 10^{11}$	0,216	0,203
NaBr	$1,58 \cdot 10^{11}$	0,236	0,200
KCl	$1,39 \cdot 10^{11}$	0,491	0,135
KBr	$1,17 \cdot 10^{11}$	0,516	0,144
KI	$9,27 \cdot 10^{10}$	0,492	0,139

összefüggéseket kapjuk, vagyis:

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= -\frac{Kb}{2\pi r} \left\{ \frac{\sin \theta [1 - 2H \cos^2 \theta]}{1 - H \sin^2 2\theta} - \frac{\cos \theta [\cos^2 \theta - \sin^2 \theta]}{1 - H \sin^2 2\theta} \right\} \\ \sigma_{yy} &= -\frac{Kb}{2\pi r} \left\{ \frac{\sin \theta [1 - 2H \cos^2 \theta]}{1 - H \sin^2 2\theta} + \frac{\cos \theta [\cos^2 \theta - \sin^2 \theta]}{1 - H \sin^2 2\theta} \right\} \\ \sigma_{zz} &= -\frac{nKb}{\pi r} \cdot \frac{\sin \theta [1 - 2H \cos^2 \theta]}{1 - H \sin^2 2\theta} \\ \sigma_{xy} &= \frac{Kb}{\pi r} (1 - H) \frac{\sin \theta \cos^2 \theta}{1 - H \sin^2 2\theta},\end{aligned}\quad (3.6.14)$$

ahol  $r$  a diszlokáció és az  $F$ -centrum távolsága,  $\theta$  a diszlokáció Burgers-vektora és az  $F$ -centrumnak a diszlokációtól számított helyvektora által bezárt szög (16. ábra).



16. ábra. A feszültségtenzor komponensei a fő kristálytani tengelyeknek megfelelő koordináta-rendszerben, belülről kifelé KI, KBr, KCl egykristály esetén

Olyan természetes fény esetén, amelyik a diszlokáció vonala mentén terjed a kristályban, az első momentum változására a következő összefüggést kapjuk (17. ábra):

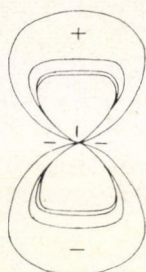
$$\Delta M_1^{(II)} = -\frac{Kb}{2\pi r} (\alpha + \beta + 2\beta n) \frac{\sin \theta [1 - 2H \cos^2 \theta]}{1 - H \sin^2 2\theta}. \quad (3.6.15)$$

Ha a természetes fény a diszlokáció vonalára merőlegesen  $[010]$  irányban terjed (18. ábra)

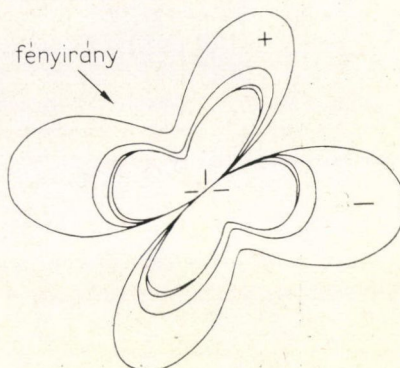
$$\Delta M_1 = \frac{Kb}{4\pi r} \left\{ (\alpha - \beta) \frac{\cos \theta (1 - 2 \sin^2 \theta)}{1 - H \sin^2 2\theta} - (\alpha + 3\beta + 2n\alpha + 2n\beta) \frac{\sin \theta [1 - 2H \cos^2 \theta]}{1 - H \sin^2 2\theta} \right\}. \quad (3.6.16)$$



Elképzelésünk szerint az első momentum ezen megváltozásai, vagyis az  $F$  sáv „eltolódása”, döntő szerepet játszanak a helyi maximumok kialakulásában. A 19. ábrán látható görbesereg az  $F$  sáv súlypontjának új helyét adja a diszlokációtól való távolságtól függően abban az esetben, ha az  $F$ -centrum az extra félsíkban, vagy annak folytatásában van, az ábrán nyíllal jeleztük, hogy egy-egy görbéhez tartozó disz-



17. ábra. Az első momentum megváltozása természetes mérőfény esetén, ha a fény a diszlokáció vonala mentén terjed, belülről kifelé KI, KBr, KCl, NaCl egykristály esetén

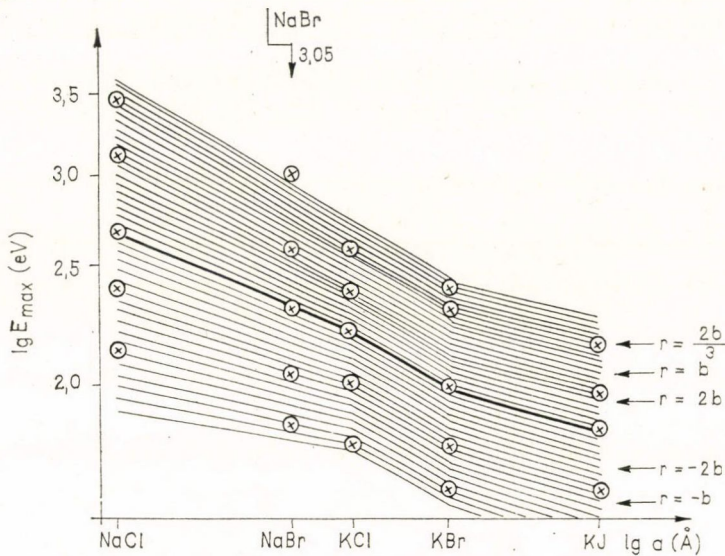


18. ábra. Az első momentum megváltozása természetes mérőfény esetén, ha a fény a diszlokáció vonalára merőlegesen terjed, belülről kifelé KI, KBr, KCl, NaCl egykristály esetén

lokáció— $F$ -centrum távolság hányszorosa a Burgers-vektornak. A 19. ábrán karikákkal jelölve ábráztunk több mint száz kiértékelhető diszlokációs fotovezetési spektrumból kapott helyi maximum értékeket, különböző alkalihalogenid kristályok esetében, a Mollwo—Ivey-összefüggést ábrázoló szokásos koordinátarendszerben. Mint látható az ábrán, a számítás és a mért mennyiségek között a megegyezés, legalább kvalitatíve, jónak mondható. Ez az egyezés, valamint az, hogy a helyi maximumok az  $F$ -centrumhoz hasonlóan, egy-egy Mollwo—Ivey-összefüggést adnak, modellünk helyességét támasztják alá.

A helyi maximumok léte arra utal, hogy a diszlokációs fotovezetési spektrum kialakulásában döntő szerepet játszó  $F$ -centrumok a diszlokáció közelében bizonyos diszkrét helyeket foglalnak el. A 19. ábra alapján kapott diszlokáció— $F$ -centrum távolságok azonban akkoráknak adódnak, amilyen távolságok mellett a használt lineáris közelítés (Volterra-diszlokáció modell) már túlfeszített.

Vizsgáljuk meg most a diszlokáció mechanikai terének hatását a diszlokációs fotovezetési spektrum szélességére. Mivel az  $F$ -centrumok elhelyezkedése a diszlokációhoz viszonyítva különböző lehet, továbbá legalább két típusú ( $[1\bar{1}0]$ , ill.  $[110]$  irányú Burgers-vektorral jellemezhető) diszlokációt kell figyelembe venni, a kiszélesedés számolásánál ezek szerint átlagolni kell.



19. ábra. Az első momentum megváltozása alapján számolt helyi maximum értékek illesztése a kísérleti pontokhoz, a görbesereg számolt, a köröcskék kísérleti értékek

A  $\vec{b} = \frac{a}{2}$  [110] Burgers-vektorú diszlokáció esetén a (3.6.13) kifejezés a következőképpen módosul:

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= \frac{\sigma'_{xx} + \sigma'_{yy}}{2} - \sigma'_{xy} \\ \sigma_{yy} &= \frac{\sigma'_{xx} + \sigma'_{yy}}{2} + \sigma'_{xy} \\ \sigma_{xy} &= \frac{\sigma'_{xx} - \sigma'_{yy}}{2}; \quad \sigma_{zz} = \sigma'_{zz},\end{aligned}\quad (3.6.17)$$

ahol a  $\sigma'_{ij}$  komponenseket a (3.6.10) összefüggések adják. Mivel az egyes perturbált  $F$ -centrumok spektrumának elmozdulásai ( $\Delta M_1$ ) a mért kiszélesedésben szerepet játszanak, ezért az átlag kiszámításánál a  $\Delta S_2(f)$ -ből és nem a  $\Delta S_2(g)$ -ből kell kiindulnunk, figyelembe véve azt is, hogy az elfogadott lineáris közelítésben  $\Delta M_1(\theta) = -\Delta M_1(\theta + \pi)$ , vagyis a diszlokációs fotovezetési spektrum súlypontja egybeesik az  $F$ -vonalak súlypontjával. Átlagot véve az  $F$ -centrum  $\theta$  szögkoordinátája, valamint a kétféle diszlokáció csúszási sík szerint, azt kapjuk, hogy a kiszélesedés ( $\Delta S_2^{(II)}$ ) abban az esetben, amikor a fény a diszlokációkkal párhuzamosan, [001] irányban terjedt:

$$\Delta S_2^{(II)} = \left( \frac{Kb}{4\pi r} \right) \frac{1}{\sqrt{1-H}} [(2-H)(\alpha + \beta + 2\beta n)^2 + (\alpha - \beta)^2 + \gamma^2(1-H)] = A \left( \frac{b}{r} \right)^2 \quad (3.6.18)$$

vagyis a kiszélesedés független a mérőfény polarizációs síkjától.



Ha a fény a diszlokációk vonalára merőlegesen a [010] irányban terjedt (20. ábra):

$$\overline{\Delta S_2^{(\perp)}} = |\eta_x|^2 \overline{\Delta S_2^{(\parallel)}} + |\eta_z|^2 \left( \frac{Kb}{2\pi r} \right)^2 \frac{2-H}{\sqrt{1-H}} (\alpha n + \beta)^2 \quad (3.6.19)$$

ahol  $\vec{\eta}$  a fény polarizációs vektora,  $r$  a diszlokáció és az  $F$ -centrum távolsága.

Kísérleti nehézségek miatt csak azt sikerült megállapítani, hogy lineárisan polarizált fény esetén a  $\Delta S_2^{(\parallel)}/\Delta S_2^{(\perp)}$  arányt a fenti képletek legalábbis kvalitatíve jól írják le.

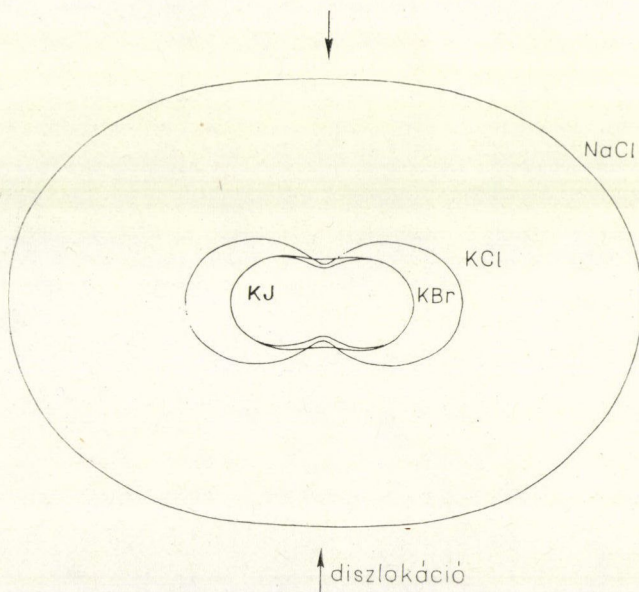
Összehasonlítva a jog Coulomb-tere és a mechanikai tér hatását, a (3.5.5) és (3.6.7), ill. (3.5.9) és (3.6.9) kifejezéseket, arra a megállapításra juthatunk, hogy minden számbajöhető diszlokáció— $F$ -centrum távolság esetén a mechanikai feszültségtér hatása lényegesen nagyobb, mint a töltött jog elektromos teréé. Ennek a megállapításnak az értékelésénél figyelembe kell azonban venni azt a tényt, hogy — ionkristályokról lévén szó — a mechanikai deformáció is elektromos teret jelent, hiszen ionokat mozdit el a helyükről.

A diszlokációs fotovezetési spektrum kialakulásában a diszlokációél elektromos kvadrupol terével kapcsolatos effektusok is szerepet játszhatnak [199], jelen értekezésben ezt a hatást nem tárgyalom, a diszlokációs kvadrupol térrel kapcsolatban az irodalom meglepően szegényes [200], ez további kutatásokat igényel.

## 5. TÁBLÁZAT

A második momentum kiszámításához szükséges  
A konstans értéke (eV)<sup>2</sup> egységben

	NaCl	KCl	KBr	KI
A	0,117	0,051	0,033	0,034



20. ábra. A második momentum megváltozása a mérőfény polarizációs síkjának függvényében, a fény [100] irányban terjed

#### 4. A diszlokáció dinamikus kölcsönhatása a ponthibák lokalizált rezgésekkel

##### 4.1. A diszlokáció jog Coulomb-terének kölcsönhatása a lokális rezgésekkel

A következőkben megnézzük, hogyan hat a gyorsan mozgó töltött diszlokációk elektromos töltéseinek Coulomb-tere a ponthibák lokális vagy kvazilokális rezgéseire [191]. Legyen  $t$  időpontban az  $l$ -edik cella  $k$ -adik atomjára ható erő  $F(l, k, t)$ . Harmonikus közelítésben az ionok mozgását a következő Hamilton-függvény írja le:

$$H = H_0 + H_1; \quad H_1 = - \sum_{lk} \bar{U}(lk) \bar{F}(lk, t)$$

$$H_0 = \sum_{lk} \frac{p^2(lk)}{2M_{lk}} + \frac{1}{2} \sum_{lk, l'k'} \bar{U}(lk) \bar{\phi}(lk, l'k') \bar{U}(l'k'), \quad (4.1.1)$$

ahol  $M_{lk}$ ,  $p(l, k)$  és  $U(l, k)$  az  $l$ -edik cella  $k$ -adik atomjának (ionjának) tömege, impulzusa és kitérése,  $\bar{\phi}(l, k; l', k')$  a kristály dinamikus mátrixa [186]. Elektromos perturbáló erő esetén:

$$\bar{F}(lk, t) = e_{lk} \bar{E}(lk, t), \quad (4.1.2)$$

ahol  $e_{lk}$  az  $(lk)$  párral jelzett ion töltése,  $E(l, k, t)$  pedig az elektromos térerősség nagysága abban a pontban, amit az adott atom (ion) egyensúlyi helyzetben elfoglal. Áttérve normál koordinátákra ( $A_s, P_s$ )

$$A_s = a_s + a_s^+; \quad P_s = \frac{\hbar}{2i} (a_s - a_s^+)$$

$$\bar{U}(lk) = \left[ \frac{\hbar}{2M_{lk}} \right]^{1/2} \sum_s \omega_s^{-1/2} \bar{B}_{(lk)}^{(s)} A_s \quad (4.1.3)$$

$$\bar{P}(lk) = \left[ \frac{2M_{lk}}{\hbar} \right]^{1/2} \sum_s \omega_s^{1/2} \bar{B}_{(lk)}^{(s)} P_s,$$

ahol  $\omega_s$  a normális rezgések frekvenciája,  $a_s^+$ ;  $a_s$  a fononok emissziós és abszorpciós operátorai:  $[a_s, a_s^+] = \delta_{ss}$ , a  $\bar{B}_{(lk)}^{(s)}$  vektorok ortonormált teljes rendszert alkotnak:

$$\sum_{lk} \bar{B}_{(lk)}^{(s)} \bar{B}_{(lk')}^{(s')} = \delta_{ss'}; \quad \sum_s B_i^{(s)}(lk) B_j^{(s)}(l'k') = \delta_{ll'} \delta_{kk'} \delta_{ij}. \quad (4.1.4)$$

A normál koordinátákra való áttérés után:

$$H_1 = \sum_s f_s(t) A_s; \quad f_s(t) = \sum_{lk} \left[ \frac{\hbar}{2M_{lk}\omega_s} \right]^{1/2} \bar{B}_{(lk)}^{(s)} \bar{F}(lk, t). \quad (4.1.5)$$

Az  $A_s(t)$  és  $P_s(t)$  operátorok Heisenberg-egyenlete a következő alakot ölti:

$$\dot{A}_s(t) = \frac{2\omega_s}{\hbar} P_s(t); \quad \dot{P}_s(t) = -\frac{\hbar\omega_s}{2} A_s(t) + f_s(t) \quad (4.1.6)$$

vagyis

$$\ddot{A}_s(t) + \omega_s^2 A_s(t) = \frac{2\omega_s}{\hbar} f_s(t). \quad (4.1.7)$$



A retardált Green-függvény segítségével a (4.1.7) egyenlet megoldása:

$$A_s(t) = A_s^{(in)}(t) + \frac{2}{\hbar} \int_{-\infty}^t \sin \omega_s((t-t')) f_s(t') dt' \quad (4.1.8)$$

itt feltételeztük, hogy  $\lim_{t \rightarrow -\infty} \vec{F} = 0$ ; az  $A_s^{(in)}$  operátor a megfelelő homogén egyenlet megoldása.

Vizsgálva egy töltött jog által kiváltott perturbációt, feltételezzük, hogy az a diszlokációval együtt egyenes vonalú pályán mozog  $v$  sebességgel az origón keresztül az  $x$  tengely irányában, a ponthiba pedig az  $y$  tengely mentén helyezkedik el  $b$  távolságra az origótól.

A szennyező atomon kívül csak kisszámú szomszéd ion vesz részt a lokális rezgésben [187, 188]. Feltételezve, hogy  $b > a$ , ahol  $a$  a legközelebbi ionok távolsága a rácspan, a (4.1.2) képletben szereplő  $E$  elektromos térerősséget sorbafejthetjük  $\vec{R}_{lk} - \vec{R}_0$  szerint, ahol  $R$  a szennyező (0), illetve környezetének ( $lk$ ) rádiuszvektora. Alkalihalogenid kristályok szubsztitúciós szennyezései esetén a szennyező atom általában szimmetria-centrum, és az  $E$  elektromos térerősség sorbafejtésében az elsőrendben kicsi tagok eltűnnek ezen szimmetria folytán. Elhagyva a másod- és magasabbrendűen kicsiny tagokat a (4.1.5) összefüggés figyelembevételével a következőket kapjuk:

$$f_s(t) = \vec{E}(0, t) \vec{g}^{(s)}; \quad \vec{g}^{(s)} = \sum_{lk} e_{lk} \left[ \frac{\hbar}{2M_{lk}\omega_s} \right]^{1/2} \vec{B}_{(lk)}^{(s)}. \quad (4.1.9)$$

Megjegyezzük, hogy a  $\vec{g}^{(s)}$  vektor szoros kapcsolatban van a dipólusmomentum operátorral:

$$\vec{d} = \sum_{lk} e_{lk} \vec{U}(lk) = \sum_s \vec{g}^{(s)} A_s \quad (4.1.10)$$

vagyis a lokális rezgés gerjesztése a dipólusmomentumnak ( $A_s \vec{g}^{(s)}$ ) a töltött jog Coulomb-terével való kölcsönhatásából származik.

Köbös kristályokban a szubsztitúciós szennyezésekkel kapcsolatos lokális optikai rezgések háromszorosan degeneráltak, a három degenerált rezgés normál koordinátáin végrehajtunk egy olyan lineáris transzformációt, hogy a  $\vec{g}^{(s)}$  vektorok a kristálytani irányokba mutassanak:

$$g_i^{(s)} = g\delta_{is}; \quad i, s = x, y, z$$

$g$  értéke a különböző hibahely-modellekre kiszámítható, de megbízhatóbb értéket ad az adott frekvencián ( $\omega_s$ ) kísérletileg kimért infravörös elnyelési színekép.

Tételezzük fel, hogy  $t=0$  időpillanatban a töltés a legközelebbi,  $b$  távolságra volt a ponthibától, így  $t$  időpillanatban a töltés Coulomb-tere a ponthiba helyén a következőképpen írható fel ( $v_x \equiv v > 0$ ):

$$\tilde{E}_x = -\frac{Zevt}{(v^2t^2 + b^2)^{3/2}}; \quad \tilde{E}_y = \frac{Zeb}{(v^2t^2 + b^2)^{3/2}} \quad (4.1.11)$$

$$\tilde{E}_z = 0,$$

ahol  $Ze$  a jog töltése. E függvények Fourier-transzformáltjai [189]:

$$\tilde{E}_x(\omega) = -i \frac{Ze\omega}{\pi v^2} K_0\left(\frac{\omega b}{v}\right); \quad \tilde{E}_y(\omega) = \frac{Ze\omega}{\pi v^2} K_1\left(\frac{\omega b}{v}\right), \quad (4.1.12)$$

ahol  $K_{0,1}(x)$  módosított harmadrendű Bessel-függvények [190]. A töltött részecske elektromos tere által létrehozott polarizációt figyelembe véve [191] kapjuk:

$$E_x(\omega) = \frac{\tilde{E}_x(\omega)}{\varepsilon(\omega)}; \quad E_y(\omega) = \frac{\tilde{E}_y(\omega)}{\varepsilon(\omega)}. \quad (4.1.13)$$

Nézzük meg mi történik a lokális rezgéssel a töltött részecske elhaladása után, ha a kölcsönhatás kezdete előtt termikus egyensúlyban volt a környezetével. Tekintetbe véve, hogy  $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} f_s(t) = 0$ , felhasználhatjuk az in-, out-operátor formalizmust, és a (4.1.8)-ból:

$$A_s^{(\text{out})}(t) = A_s^{(\text{in})}(t) + u_s e^{-i\omega_s t} + u_s^* e^{i\omega_s t}$$

$$u_s = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_s t} f_s(t) dt. \quad (4.1.14)$$

Az  $A_s(t)$  Heisenberg-operátor gyakorlatilag megegyezik az  $A_s^{(\text{out})}(t)$  operátorral  $t \gg \frac{b}{v}$  időkre, mivel ekkor  $f_s(t) \cong 0$ . A (4.1.11)–(4.1.14) összefüggésekre való tekintettel:

$$u_x = \gamma K_0\left(\frac{\omega_s b}{v}\right); \quad u_y = i\gamma K_1\left(\frac{\omega_s b}{v}\right)$$

$$\gamma = \frac{2Zeg\omega_s}{\hbar v^2 \varepsilon(\omega_s)}. \quad (4.1.15)$$

Mint fentebb feltételeztük, a lokális rezgés termikus egyensúlyban volt a kölcsönhatás kezdete előtt, vagyis sűrűségmátrixa,  $(\varrho_0)$  egyenlő volt:

$$\varrho_{so} = \varrho_s^{(\text{in})} = e^{-\frac{\hbar\omega_s(a_s^+ a_s + 1/2)}{kT}}. \quad (4.1.16)$$

A kölcsönhatás utáni sűrűségmátrixot  $(\varrho_1)$  a koherens állapot reprezentációban (2.3 pont) a legkönnyebb előállítani.  $P$ -reprezentációban:

$$\varrho_0 = \int d^2\alpha P_0(\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha|; \quad P_0(\alpha) = \frac{1}{\pi n(T)} e^{-\frac{|\alpha|^2}{n(T)}}$$

$$a_s |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle, \quad (4.1.17)$$

ahol  $P_0$  a  $P$ -reprezentáció sűrűségfüggvénye,  $n(T)$  a  $T$  hőmérsékletnek megfelelő betöltöttségi szám:

$$n(T) = [e^{\frac{\hbar\omega_s}{kT}} - 1]^{-1}.$$



Tekintettel arra, hogy mint azt a 2.3 pontban tárgyaltuk:

$$|\alpha\rangle = D(\alpha)|0\rangle; \quad D(\alpha) = e^{\alpha a_s^\dagger - \alpha^* a_s} \quad (4.1.18)$$

ahol  $D(\alpha)$  unitér eltolási operátor, valamint, hogy  $A_s^{\text{out}}(t) = S^\dagger A_s^{\text{(in)}} S$  azt kapjuk, hogy jelen esetünkben az  $S$  szórási operátor egyenlő  $S_{x,y} = D(u_{x,y})$ , és így

$$\varrho_1 = S \varrho_0 S^\dagger = \int d^2 \alpha P_0(\alpha) D(U_s) D(\alpha) |0\rangle \langle 0| D^\dagger(\alpha) D^\dagger(U_s). \quad (4.1.19)$$

Felhasználva a (4.1.18) összefüggést és a  $D(\alpha)$ , eltolási operátorok szorzási szabályát [141]:

$$D(\alpha_2) D(\alpha_1) = D(\alpha_1 + \alpha_2) e^{\frac{1}{2}(\alpha_2 \alpha_1^* - \alpha_2^* \alpha_1)} \quad (4.1.20)$$

a következőt kapjuk

$$\varrho_1 = \int d^2 \alpha P_1(\alpha) |\alpha\rangle \langle \alpha|,$$

ahol

$$P_1(\alpha) = \int d^2 \alpha' P_0(\alpha') \delta(\alpha - \alpha' - U_s) = \frac{1}{\pi n(T)} e^{-\frac{|\alpha - U_s|^2}{n(T)}}. \quad (4.1.21)$$

A (4.1.21) képlet lehetővé teszi, hogy miután normál szorzatösszegekké alakítottuk át, kiszámítsuk a különböző  $a$ -tól, ill.  $a^+$ -tól függő operátorok középértékeit.

$$\begin{aligned} \langle (a_s^+(t))^n (a_s(t))^m \rangle &= S_p \{ \varrho_1 (a_s^+(t))^n (a_s(t))^m \} = \\ &= \frac{1}{\pi n(T)} \int d^2 \alpha (\alpha^* + u_s^+)^n (\alpha + u)^m e^{-\frac{|\alpha|^2}{n(T)} + i(n+m)\omega_s t}. \end{aligned} \quad (4.1.22)$$

Áttérve polárkoordinátákra az  $\alpha$  komplex síkban a (4.1.22) összefüggésben szereplő integrálok könnyen kiszámíthatók:

$$\frac{1}{\pi n(T)} \int d^2 \alpha (\alpha^*)^i \alpha^j e^{-\frac{|\alpha|^2}{n(T)}} = [n(T)]^i i! \delta_{ij}. \quad (4.1.23)$$

Így a (4.1.22) és (4.1.23) képletekből következik, hogy az  $a$ , ill.  $a^+$  operátoroktól lineárisan függő operátorok középértékeit az  $a_s \rightarrow u_s$ ,  $a_s^+ \rightarrow u_s^+$  behelyettesítéssel kapjuk meg, az emissziós, ill. abszorpciós operátoroktól négyzetesen függő operátorok középértékeit pedig a  $\langle a_s^+ a_s \rangle = n(T) + |u_s|^2$  kifejezés adja meg.

Ebből egy ponthiba három degenerált módusa által a töltéssel való kölcsönhatás során felvett energiára a következőt kapjuk:

$$E_1(b) = \frac{4g^2 Z^2 e^2 \omega_s^3}{tv^4 [\varepsilon(\omega_s)]^2} \left\{ \left[ K_0 \left( \frac{\omega_s b}{v} \right) \right]^2 + \left[ K_1 \left( \frac{\omega_s b}{v} \right) \right]^2 \right\}. \quad (4.1.24)$$

Megjegyezzük, hogy a kapott eredményeket nyilvánvaló módon lehet általánosítani a töltés tetszőleges irányú egyenes vonalú egyenletes mozgására, pl. köbös kristály esetén az energiafelvételt leíró (4.1.24) képlet változatlan marad.

A továbbiakban megnézzük, hogy egységnyi út befutása után a töltött jog mennyi energiát adott át a lokális fononoknak Coulomb-kölcsönhatás formájában, feltételezve, hogy a ponthibák koncentrációja a kristályban ( $N_c$ ) állandó.

$$E = N_c \int_{b_0}^{\infty} 2\pi b E_1(b) db = Dv^{-3} K_0 \left( \frac{\omega_s b_0}{v} \right) K_1 \left( \frac{\omega_s b_0}{v} \right)$$

$$D = \frac{8\pi b_0 Z^2 e^2 g^2 \omega_s^2 N_c}{\hbar [\varepsilon(\omega_s)]^2}, \quad (4.1.25)$$

ahol  $b_0$  a minimális ütközési paraméter.

Legyen  $n_z$  a diszlokáció egységnyi hosszán elhelyezkedő  $Ze$  töltésű jogok száma, akkor a lokális fononokkal való Coulomb-kölcsönhatásból származó egységnyi diszlokációra ható fékező erő ( $F$ ):

$$F = n_z E. \quad (4.1.26)$$

Ez a fékező erő erősen függ a diszlokáció sebességétől, és határozott maximuma van  $\frac{\omega_s a}{v} \sim 1$  értéknél. Ha a  $v$  sebességgel mozgó diszlokációk sűrűsége  $N_d$ , akkor egységnyi idő alatt  $V$  térfogatban az általuk leadott energia ( $W_d$ ):

$$W_d = N_d \cdot F \cdot v \cdot V. \quad (4.1.27)$$

A lokális rezgések a tárolt energia nagy részét az anharmonikus kölcsönhatás folytán leadják a kristálynak, egy kis részét infravörös sugárzás formájában kisugározzák. Az egy ponthiba által kisugárzott teljes energia ( $\varepsilon$ ):

$$\varepsilon = 2\Gamma_r E \int_0^{\infty} e^{-2\Gamma t} dt = \frac{E\Gamma_r}{\Gamma}; \quad \Gamma_r = \frac{2g^2\omega_s^3}{3\hbar c^3} \sqrt{\varepsilon(\omega_s)}, \quad (4.1.28)$$

ahol  $\Gamma$  a lokális rezgés infravörös spektrumának félszélessége.

A (4.1.27) képlet alapján egy hasonló kifejezést kapunk a  $V$  térfogathoz kisu-gárzott infravörös fény intenzitására ( $I$ ):

$$I = W_d \frac{\Gamma_r}{\Gamma}, \quad (4.1.29)$$

Nézzük meg, hogy a fent említett két mennyiség, a diszlokációt fékező erő ( $F$ ) és a kisugárzott fény intenzitására ( $I$ ) milyen értéket várhatunk. Mivel az éldiszlokációk sebességének határt szab a transzverzális hanghullámok sebessége, nagyfrekvenciás lokális rezgések esetén ( $\omega \cong 10^{14} \text{ sec}^{-1}$ ) távol vagyunk az említett  $\frac{\omega b}{v} \sim 1$  körüli maximumtól, ezért  $F$  és  $I$  értéke kicsiny.

Nagyobb értékeket várhatunk az optikai és akusztikai ágak közötti tiltott sávban elhelyezkedő ún. gap-módusok, de még inkább a kvázilokális rezgések esetében.

KBr(Li) rendszerben ( $\omega_0 = 4 \cdot 10^{12} \text{ sec}^{-1}$  [187]) megbecsültük  $F$  és  $I$  értékét a következő paraméterek mellett:  $N_d = 10^8 \text{ cm}^{-2}$ ,  $N_c = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ;  $n = 4 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$



[192],  $v = 6 \cdot 10^4$  cm/sec, ekkor  $F \approx 2,8$  din/cm; ill. a neki megfelelő nyírási feszültség  $\sigma = \frac{F}{b} \approx 0,56$  kp/mm<sup>2</sup>, ahol  $b$  a Burgers-vektor hossza;  $I \approx 2 \cdot 10^{-7}$  V · joule/cm<sup>3</sup> sec,  $V$  a kristály térfogata.

A fékező erő összemérhető a különböző egyéb kölcsönhatásokból kiszámított fékező erővel, de kisebb, mint a kísérleti érték, amelyet [193] alapján 120 din/cm-nek becsülhetünk ilyen sebesség mellett. Az intenzitás elvileg mérhető érték és információt adna a gyors terhelésekkor a kristály belsejében lejátszódó folyamatokról.

#### 4.2. A diszlokáció mechanikai feszültségterének kölcsönhatása a rezgésekkel

Frenkel és Kontorova klasszikus cikke óta több dolgozatban foglalkoztak a diszlokációk energiavesztésével azon kényszerrezgések miatt, melyeket a diszlokáció kelt a rács saját atomjain [118, 123], ill. rácshibákon [120, 121, 124–126].

Mint kimutattuk [204], több diszlokáció együttes kölcsönhatásának vizsgálata a rácshibákkal új felismerésekhez vezethet. Vizsgáljuk meg azt a kérdést az előző fejezetben taglalt formalizmus segítségével [205].

Mozogjon egy diszlokáció  $v$  sebességgel egyenes vonalú egyenletes pályán, csúsztató síkjában. Mozgása során kölcsönhat azokkal a ponthibákkal, amelyek mellett harmonikus közelítésben a (4.1.1) összefüggés adja, ahol jelen esetben  $F(l, k, t)$  az az erő, amellyel a diszlokáció mechanikus feszültségtere hat az  $l$ -ik cella  $k$ -ik atomjára. Ugyanúgy mint a 4.1. pontban áttérünk normál koordinátákra és tekintettel arra, hogy ismét  $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} f_s(t) = 0$ :

$$A_s(t) = A_s^{(in)}(t) + u_s e^{-i\omega_s t} + u_s^* e^{i\omega_s t} \quad (4.2.1)$$

és ebből kifolyólag a kölcsönhatás utáni sűrűségmátrix ( $\varrho_1$ ):

$$\varrho_1 = \int d^2\alpha P_1(\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha|; \quad P_1(\alpha) = \frac{1}{\pi n(T)} e^{-\frac{|\alpha - u_s|^2}{n(T)}}. \quad (4.2.2)$$

Egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy a kristályban csak egyféle, a diszlokációval való kölcsönhatás szempontjából lényeges ponthiba van, mégpedig olyan koncentrációban, hogy a ponthibák egymás közötti kölcsönhatását elhanyagolhatjuk. Ebben az esetben az  $s$  indexet két szimbólummal helyettesíthetjük, jelölje  $i$  az  $i$ -edik ponthibát és  $p$  a ponthibán lokalizált  $p$ -edik rezgési módust. A (4.2.1) képlet alapján az  $i$ -ik ponthibának átadott energia ( $E_i$ ):

$$E_i = \hbar \sum_p \omega_p |u_{ip}|^2, \quad (4.2.3)$$

ahol az összegzést a lokális módusok szerint kell elvégezni. A levezetésnél feltételeztük, hogy a diszlokáció és a ponthiba kölcsönhatásának időtartama alatt a rezgés lecsengésétől eltekinthetünk. Ez a feltétel gyors diszlokációnál és legalább közepes élettartamú lokális vagy rezonancia rezgéseknél kielégül. A levezetés során volt egy másik, természetesnek tűnő feltevésünk, hogy a kölcsönhatás kezdete előtt a rezgés termikus egyensúlyban volt a környezetével.



A második feltétel láthatóan nem fog kielégülni, ha a diszlokációt egy másik, vele azonos sebességgel mozgó diszlokáció előzte meg a ponthibával való kölcsönhatásban, hiszen ebben az esetben a rezgés kölcsönhatása előtti kezdeti állapotát (a második diszlokációval való kölcsönhatásról beszélünk most) éppen a  $\varrho_1$  sűrűségmátrix írja le.

A (4.1.17)–(4.1.21) összefüggések alapján, figyelembe véve, hogy  $\varrho_0$  helyét most a  $\varrho_1$  vette át, megkapjuk a második diszlokáció elhaladása utáni sűrűségmátrixot:

$$\varrho_2 = \int d^2\alpha P_2(\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha|; \quad P_2(\alpha) = \frac{1}{\pi n(T)} e^{-\frac{|\alpha - u_{ip} - u'_{ip}|^2}{n(T)}}, \quad (4.2.4)$$

ahol, amennyiben a második diszlokáció  $l$  távolságra követi az első

$$u'_{ip} = u_{ip} e^{\frac{i\omega_p l}{v}}$$

és a két diszlokáció által az  $i$ -edik ponthibának átadott energia

$$E_i^{(2)} = \sum_p |u_{ip} + u'_{ip}|^2 \hbar \omega_p = 4\hbar \sum_p \omega_p |u_{ip}|^2 \cos^2 \frac{\omega_p l}{2v}. \quad (4.2.5)$$

Ha az első diszlokáció kölcsönhatása a ponthibával gyakorlatilag befejeződött, amikor a második diszlokáció kölcsönhatása a ponthibával lényegessé válik, szemléletesen külön tudjuk választani a két diszlokáció által elvesztett energiákat.

Amíg az első diszlokáció energiavesztése  $E_i$ , a másodiké:

$$E_i^{(II)} = E_i^{(2)} - E_i = 2\hbar \sum_p \omega_p |u_{ip}|^2 \cos \frac{\omega_p l}{v} + E_i. \quad (4.2.6)$$

Összegezve az energiavesztéseket a (4.2.3), (4.2.6) kifejezésekben azon ponthibák szerint, amelyekkel az egységnyi hosszú diszlokáció kölcsönhatott egységnyi úton, megkapjuk az egységnyi hosszú diszlokációra ható, ebből a kölcsönhatásból származó erő nagyságát.

Egy diszlokáció esetén  $F_1 = \sum_i E_i$ , két diszlokációra

$$F^{(2)} = \sum_i E_i^{(2)} = 4\hbar \sum_i \sum_p \omega_p |u_{ip}|^2 \cos^2 \frac{\omega_p l}{v}. \quad (4.2.7)$$

Ilyen módon a második diszlokációra az első diszlokációra is ható  $F_1$  súrlódási erőn kívül, hat egy új erő ( $F$ ):

$$F = F^{(2)} - 2F_1 = 2\hbar \sum_i \sum_p \cos \frac{\omega_p l}{v} |u_{ip}|^2 \omega_p. \quad (4.2.8)$$

Szemléletesség kedvéért bevezethetünk egy  $F_p$  mennyiséget, a ponthiba  $p$ -edik módusával való kölcsönhatás miatt az első diszlokációra ható fékezőerőt:

$$F_p = \sum_i \hbar \omega_p |u_{ip}|^2,$$



és ekkor a második diszlokációra ható új erő:

$$F = 2 \sum_p \cos \frac{\omega_p l}{v} F_p \quad (4.2.9)$$

vagyis a második diszlokációra az első diszlokációnak a ponthibákra gyakorolt hatása miatt egy, a két diszlokáció távolságával periodikusan változó erő hat. Ez az erő az első diszlokációhoz képest gyorsítja vagy lassítja a második diszlokációt. A (4.2.9) kifejezés  $F$ -t mint tiszta periodikus függvényt írja le, ez abból következik, hogy a problémát harmonikus közelítésben tárgyaltuk.

Figyelembe véve a kristály anharmonicitását, a (4.1.1) kifejezésben megjelenik egy  $H_A$  Hamilton-operátor tag [186]:

$$H_A = \sum_{s_1 s_2} V_{s_1 s_2 s} A_{s_1} A_{s_2} A_s. \quad (4.2.10)$$

Ezt a tagot elhanyagolhatjuk azon időre, amíg egy diszlokáció egy bizonyos ponthibával kölcsönhat, tekintettel arra, hogy az  $f_s(t)$  függvények csak igen rövid ideig különböznek jelentősen nullától; figyelembe kell azonban ezt a tagot venni az első diszlokáció elhaladásakor keletkezett részleges koherens állapot lecsengésekor.

$H_A$  ilyen értelmű figyelembevétele a (4.2.2) kifejezésben okoz változást:

$$\tilde{P}_1(x) = \frac{1}{\pi n(T)} e^{\frac{|\alpha - \tilde{u}_{ip}|^2}{n(T)}}; \quad \tilde{u}_{ip} = u_{ip} e^{-\Gamma_p t}, \quad (4.2.11)$$

ahol  $\Gamma_p$  a  $p$ -edik lokális módus reciprok élettartama. Tekintetbe véve, hogy a második diszlokáció  $\tau = \frac{l}{v}$  idővel késik az elsőhöz képest, a (4.2.9) kifejezés a következőképpen módosul:

$$F = 2 \sum_p e^{-\frac{\Gamma_p l}{2v}} \cos \frac{\omega_p l}{v} F_p. \quad (4.2.12)$$

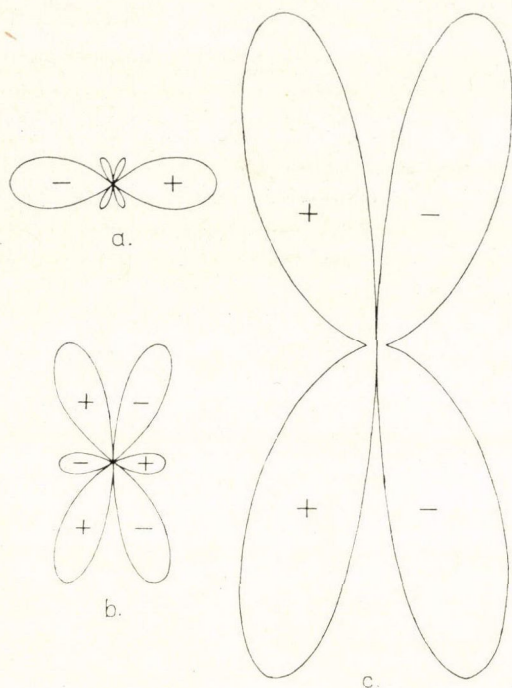
Ha a ponthiba lokális rezgési módusai degeneráltak,  $\omega_p \equiv \omega_0$ , az  $F$  erőt leíró képlet egyszerűsödik:

$$F = 2e^{-\frac{\Gamma l}{2v}} \cos \frac{\omega_0 l}{v} F_1. \quad (4.2.13)$$

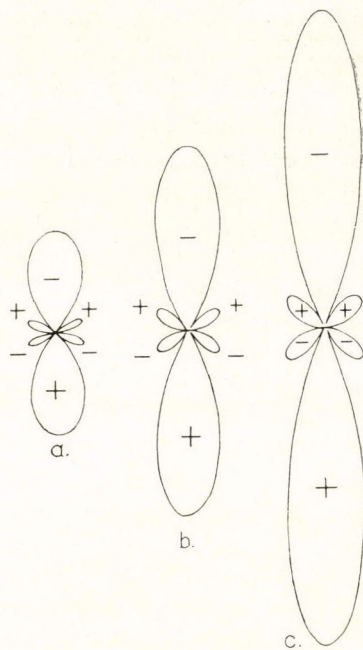
Ily módon a második diszlokáció az elsőhöz képest egy  $L = \frac{2\pi v}{\omega_0}$  „periódusú”, a távolsággal  $\frac{\Gamma}{2v}$  állandóval lecsengő erőterben mozog. E potenciálrelief nagysága  $F_1$  nagyságától függ ((4.1.5) és (4.2.7) alapján):

$$F_1 = \sum_i \sum_p \left| \sum_{lk} \frac{1}{\sqrt{2M_{lk}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_p t} \vec{F}(lk, t) \vec{B}_{(lk)}^{(ip)} dt \right|^2. \quad (4.2.14)$$

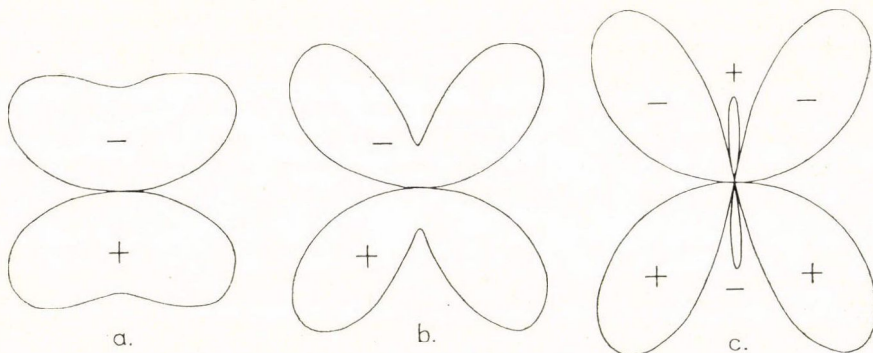
Ennek számszerű meghatározása rendkívül bonyolult feladat, tudniillik  $F_1$  a „relativisztikusan” mozgó diszlokáció magjának és a ponthibáknak a konkrét kölcsönhatásától függ.



21. ábra. A  $\sigma_{xy}$  feszültségtenzor komponens változása a diszlokáció sebességének függvényében ( $a: v=0$ ,  $b: v=0,9 c_R$ ,  $c: v=1,01 c_R$ ).



22. ábra. A  $\sigma_{yy}$  feszültségtenzor komponens változása a diszlokáció sebességének függvényében ( $a: v=0$ ,  $b: v=0,9 c_R$ ,  $c: v=1,01 c_R$ ).



23. ábra. A  $\sigma_{xx}$  feszültségtenzor komponens változása a diszlokáció sebességének függvényében ( $a: v=0$ ,  $b: v=0,9 c_R$ ,  $c: v=1,01 c_R$ ).



Az  $F_1$ -nek megfelelő maximális nyírási feszültségre ( $\sigma$ ) különböző ötvözetekben a következő becslési értéket kapták:  $\sigma \sim 0,1 c \cdot \text{kg mm}^{-2}$  [124] vagy annál egy nagyságrenddel többet [126], ahol  $c$  a ponthiba koncentrációja atom százalékban kifejezve.

Mindenesetre rá kell mutatni, hogy van egy olyan  $v > c_R$  sebességtartomány, ahol az általunk tárgyalt  $F$  erő döntő szerepet játszhat.

Ahogy azt irodalmi áttekintésben láttuk, a  $v > c_R$  esetén az együtt mozgó azonos előjelű diszlokációk taszítás helyett vonzzák egymást és sok ilyen diszlokáció összeesése egy gigantikus diszlokációba a gyors terheléseknél fellépő repedések egyik oka lehet. Ez különösen jelentősnek tűnik, ha meggondoljuk, hogy terheléseknél gyakori egy-egy csúszási síkban sok diszlokáció megjelenése.

Tekintettel arra, hogy  $v = c_R$  sebességnél a nyírási feszültség a csúszási síkban és vele együtt a *Weertman* által kimutatott vonzóerő nullává válik, míg az általunk tárgyalt  $F$  erő, mely függ a feszülstégtenzor többi komponenseitől is, véges marad (21—23. ábrák). Így az  $F$  erő, amely közel periodikusan változik, a diszlokációkat egy követési távolság betartására kényszerítheti (a jelenséget szemléletesen „forgóajtó” effektusnak nevezhetnénk) és így elvileg van lehetőség, megfelelő ponthibák létrehozásával, a *Weertman* által tárgyalt repedésképződési mechanizmus befolyásolására. Mivel az effektus nagyságát elméletileg nagyon durván lehet csak becsülni, kísérleti vizsgálat látszik szükségesnek.

A diszlokáció és a rezgési módusok közötti kölcsönhatásnak van egy határozott maximuma, ha  $\omega a \sim v$ , ahol  $a$  a kristály rácállandója. Általában a kvázilokális rezgések elégítik ki ezt az összefüggést  $v \sim c_R$  diszlokáció sebességek esetén.

A fentieket figyelembe véve a kérdéses kísérlet a következő lehetne: Az  $\omega a \sim v$  feltétel mellett kiválasztott szennyező különböző koncentrációjú híg ötvözetét sokszori terhelésnek alávetve megnézni, hogyan függ a keletkező mikroropedések száma a szennyező koncentrációtól.

Kontrollkísérletként olyan szennyezőt kell választani, amelyik hasonló nagyságú erővel hat a diszlokációkra, de ugyanakkor nem elégíti ki a fenti  $\omega a \sim v$  rezonanciafeltételt.

## 5. Az eredmények összefoglalása (tézisek)

### I. A kitűzött kutatási feladat rövid összefoglalása, irodalmi előzmények

A kristályos anyagban a diszlokációk viselkedése sok szempontból meghatározója az adott anyag tulajdonságainak. Pl. a szilárd test képlékeny alakváltozása csak a diszlokációk szerepének figyelembevételével érthető meg.

A diszlokációk tulajdonságait az egymással és a kristályban levő egyéb hibastruktúrával, így a ponthibákkal való kölcsönhatásuk erősen befolyásolja. A ponthibák a diszlokációkat rögzíthetik (az ún. pinning modell); a diszlokáció közvetlen környezetében a ponthibák koncentrációja lényegesen más, mint a kristályban mutatózó átlagos koncentráció, az így kialakult ponthiba felhő erőteljesen visszahat a diszlokáció tulajdonságaira. Ennek a problémakörnek, fontosságára való tekintettel óriási irodalma van.

A diszlokációk nem fémek anyagokban gyakran rendelkeznek elektromos töltéssel.  $AB$  típusú poláris félvezetőkben a diszlokációél állhat csupa  $A$  vagy  $B$ .



típusú atomból, ekkor beszélünk  $\alpha$ -, ill.  $\beta$ -diszlokációról. Tekintettel arra, hogy az  $A$ , ill.  $B$  típusú atomok többé-kevésbé ionos tulajdonságúak, az ilyen diszlokációk jelentős töltéssel rendelkezhetnek. Kifejezetten ionkristályok esetén a diszlokációél energetikai okokból nem állhat egyforma előjelű ionokból, a diszlokáció töltése ilyen kristályokban főleg hibahely eredetű. Az elektromos töltés jelenléte elektromos erőter megjelenésével jár együtt.

A diszlokáció torzítja a környezetében levő kristályrácsot és ennek következtében mechanikai feszültségtér van.

Ennek megfelelően a diszlokáció környezetében mechanikai és gyakran elektromos erőter van, ezek az erők kölcsönhatnak a ponthibákkal.

A diszlokáció mechanikus feszültségtérének hatását általában mint méret-effektust, vagy mint modulus effektust tárgyalják, figyelembe véve azt, hogy a ponthiba egyrészt méreteiben különbözik az ép rácsot alkotó atomoktól, másrészt a ponthiba közvetlen környezetében megváltoznak a kristály rugalmassági állandói.

A diszlokáció elektromos terének a ponthibákkal való kölcsönhatását általában mint egy elektrosztatikus térnek elektromosan töltött kristályhibákkal való kölcsönhatását vizsgálják.

Jelen értekezés célja az édiszlokációk mechanikai, ill. elektromos feszültségtér hatásának vizsgálata a ponthibákon lokalizált elektronokra és rezgésekre, ugyanakkor nem tárgyal más diszlokáció—ponthiba kölcsönhatásokat.

A diszlokációs tér hatása a környezetében levő ponthibákra a szokásos módszerekkel általában nehezen észlelhető, a jelenséget ui. diszlokációktól távol levő, viszonylag nagyszámú és a diszlokációkkal alig kölcsönható ponthibák a közvetlen mérés számára elfedik. A kitűzött cél tehát új módszereket igényel.

## II. Az alkalmazott módszerek

A kísérleteket az MTA Kristályfizikai Kutatólaboratóriumában (1976 előtt a Semmelweis OTE Biofizikai Intézet MTA Kristályfizikai Tanszéki Kutató Csoportban) végeztük a *Turchányi György* vezetése alatt kifejlesztett speciális módszer, a diszlokációs fotovezetés segítségével. A módszer lényege az, hogy a fotovezetést nem a kristályra kívülről ráadott elektromos feszültség, hanem a kristály deformálásakor megjelenő, a töltött diszlokációk elmozdulásából származó belső elektromos tér segítségével mérjük.

*Vizsgálati anyagként* névlegesen tiszta, valamint kutatólaboratóriumunkban növesztett, nagy tisztaságú (OH-mentes) alkali-halogenid (NaCl, NaBr, KCl, KBr, KI) egykristályokat használtunk. A kristályok színezése részben röntgen-, ill. korpuszkuláris sugárzással, részben additíve történt.

Elméleti vizsgálataimban felhasználtam a *momentumok módszerét*, pontosabban annak Henry, Schnatterly és Slichter által kidolgozott változatát. A módszer előnye az, hogy a teljes spektrumfüggvény helyett elegendő kiszámolni annak egyes momentumait (a spektrum alatti terület, a spektrum súlypontját, tehetetlenségi nyomatékát stb.), amihez nincs szükség a teljes hullámfüggvény ismeretére.

Számításaimban alkalmaztam még a *koherens állapotok formalizmust*. Ezzel elkerültem azt, hogy a 4. fejezetben részletezett számításoknál a perturbációs számítást alkalmazzam, amivel kapcsolatban bizonyos feltételekre lett volna szükség, a perturbáló hatás nagyságát illetően.



### III. Új tudományos eredmények összefoglalása

1. Értelmeztem a diszlokációs fotovezetési spektrumot, mint olyan  $F$ -spektrumot, amelyet a diszlokáció elektromos és mechanikai tere perturbált.

2. Megvizsgáltam a kristály véges vastagságából származó, a különböző hullámhosszúságú fény nem egyforma elnyelődésén alapuló „geometriai effektus” hatását a diszlokációs fotovezetési spektrumra. Vastag, erősen színezett kristály esetén a geometriai effektus a diszlokációs fotovezetési spektrum erős kiszélesedését, sőt az  $F$ -maximum tartományában egy határozott minimum létrejöttét eredményezi; vékony és gyengén színezett próbadarabok esetén hatása elhanyagolható.

3. Abból a feltételezésből kiindulva, hogy a diszlokációs fotovezetési spektrum azért különbözik az  $F$ -spektrumtól, mert a diszlokációs fotovezetési spektrumot adó  $F$ -centrumokat a diszlokációval kapcsolatos elektromos tér perturbálta, megbecsültem az éldiszlokációk környezetében kialakult effektív elektromos térerősség nagyságát négy különböző alkali-halogenid kristályban.

A kapott térerősség értékek  $0,5-1 \frac{\text{V}}{\text{nm}}$  körülnek adódtak.

4. Kimutattam, hogy a diszlokációs fotovezetési spektrum helyi maximumai közelítőleg követik az  $F$ -sávra érvényes Mollwo—Ivey-szabályt.

5. A Mollwo—Ivey-szabályból kiindulva, azon feltételezés mellett, hogy a diszlokációs fotovezetési spektrum helyi maximumait az éldiszlokáció környezetében torzult rács miatti spektrumeltolódások hozzák létre, megbecsültem a diszlokáció környezetében az effektív iontávolságokat NaCl, NaBr, KCl, KBr és KI kristályban. A kapott értékek olyan  $F$ -centrumokhoz tartoznak, amelyek a diszlokáció környezetének egyrészt dilatált, másrészt komprimált tartományában vannak. Különösen érdekesek a dilatált tartományra vonatkozó adatok, mert amíg külső nyomással végzett kísérlettel a komprimált tartományban levő  $F$ -centrum viselkedése elég jól vizsgálható, addig a dilatáció hatásának kísérleti tanulmányozása erősen korlátozott, hiszen a kristályt csak minimálisan lehet széthúzni.

6. A momentumok módszere segítségével megvizsgáltam, hogyan hat az  $F$ -centrum spektrumának első és második momentumára a diszlokáció töltött jogjának elektromos tere. Hasonló módon vizsgáltam a diszlokáció mechanikus feszültségterének hatását. Számításaim szerint a tér lényegesen erősebben változtathatja meg a spektrumot, mint a jog elektromos tere. A kapott első momentum változás alapján számolt helyi maximum értékek elég jól illeszthetők a kísérleti értékekhez.

7. Megvizsgáltam a ponthibákön lokalizált rezgések és a gyorsan mozgó töltött diszlokációk jogjainak kölcsönhatását. Számításaim szerint az ebből a kölcsönhatásból eredő, a diszlokációra ható fékező erő összemérhető az egyéb fékező mechanizmusok alapján számolt erővel, de kisebb, mint a kísérletileg várható fékezőerő.

8. Vizsgáltam a gyorsan mozgó diszlokációk mechanikai feszültségterének kölcsönhatását a ponthibákön lokalizált rezgésekkel. A diszlokációk kooperatív mozgásából adódó törvényszerűségek figyelembevételével kimutattam, hogy az együttmozgó diszlokációk között a diszlokációk és a lokalizált rezgések közötti kölcsönhatásból kifolyólag egy új erő lép fel. Két diszlokáció esetén az első diszlokáció bizonyos értelemben egy dinamikus domborzatot húz maga után, amelyen a másik diszlokáció mozog, és az egymás közötti távolság függvényében az első diszlokációhoz közeledik, vagy attól távolodik.

9. Ráműtattam arra, hogy a diszlokációk és lokalizált rezgések közötti kölcsönhatásból eredő erő a diszlokációkat bizonyos követési távolság tartására kényszerítheti és ezzel lehetőség nyílik a Weertman-féle, az együttmozgó gyors diszlokációk egymást vonzásából eredő repedésképző mechanizmus befolyásolására.

### IRODALOM

1. Gyulai Z., Hartly D., Z. Phys. 51, 378, 1928.
2. R. W. Whitworth; Adv. Phys. R24, 203, 1975.
3. P. Camagni, A. Manara, J. Phys. Chem. Solids 26, 449, 1965.
4. Jeszenszky B., Kiss J., Z. Phys. 169, 723, 1962.
5. Kiss J., Acta Phys. Hung. 24, 241, 1968.
6. D. B. Fischbach, A. S. Nowick, J. Phys. Chem. Solids 5, 302, 1958.
7. M. C. Shine, R. K. McCrone, Phys. Rev. 176, 1968.
8. D. B. Fischbach, A. S. Nowick, J. Phys. Chem. Sol. 2, 226, 1957.
9. B. S. H. Royce, R. Smoluchowski, Phys. Rev. 122, 1125, 1961.
10. P. H. Sutter, A. S. Nowick, J. Appl. Phys. 34, 734, 1963.



11. F. Fröhlich, G. Hensel, Krist. Tech. 8, 327, 1973.
12. F. Fröhlich, G. Hensel, J. Ziller, Phys. stat. sol. A6, 165, 1971.
13. L. Froschauer, B. Ilschner, Phys. stat. sol. 39, 329, 1970.
14. A. V. Stepanov, Z. Phys. 81, 560, 1933.
15. A. V. Stepanov, Phys. Z. Sowj. 4, 609, 1933.
16. J. E. Caffin, T. L. Goodfellow, Nature 176, 878, 1955.
17. Kiss J., Krisztallografia 10, 890, 1965.
18. Ju. N. Martisev, Krisztallografia 10, 224, 1965.
19. F. Fröhlich, P. Seifert, Phys. stat. sol. 25, 303, 1968.
20. M. V. Galusztasvili, Fiz. Tv. Tela 12, 1263, 1970.
21. C. H. S. Dupuy, Bull. Soc. Fr. Miner. Crystallogr. 88, 533, 1965.
22. Tóth A., Sárközi J., Voszka R., Periodica politechn. elec. Eng. 16, 205, 1972.
23. Tóth A., Sárközi J., Phys. stat. sol. (a) 30, K 193, 1975.
24. Tóth A., Sárközi J., Phys. stat. sol. (a) 28, K 93, 1975.
25. Tóth A., Kiss J., Phys. stat. sol. (a) 19, K 61, 1973.
26. Tóth A., Phys. stat. sol. (a) 33, K 47, 1976.
27. V. I. Alsic, M. V. Galusztasvili, I. M. Paperno, Krisztallografia 20, 1113, 1975.
28. S. Amelinckx, J. Vennik, G. Remaut, J. Phys. Chem. Solids 11, 170, 1959.
29. V. Vennik, G. Remaut, W. Dekeyser, Phil. Mag. 6, 997, 1961.
30. R. de Batist, E. Van Dingen, Ju. N. Martisev, I. M. Szilvestrova, A. A. Urusovszkaja, Krisztallografia 12, 1012, 1967.
31. R. W. Whithworth, Phil. Mag. 15, 305, 1967.
32. T. Yoshiyama, M.-h. Mannami, K. Tanaka, J. Phys. Soc. Japan 24, 1019, 1968.
33. H. M. Halilov, A. J. Agaev, V. M. Zuev, Ja. S. Paligavili, Fiz. Tv. Tela 10, 1231, 1968.
34. E. Van Dingenen, Phil. Mag. 31, 1263, 1975.
35. A. R. Anderson, H. F. Pollard, J. Phys. C. Solid State Phys. 9, 247, 1976.
36. R. L. Sproull, Phil. Mag. 5, 815, 1960.
37. E. G. Svidkovskij, A. N. Tyapunina, E. P. Belozerova, Krisztallografia 7, 471, 1962.
38. N. V. Zagorujko, Krisztallografia 10, 81, 1965.
39. N. V. Zagorujko, Krisztallografia 11, 451, 1966.
40. D. G. Drijajev, V. A. Melik-Sahnazarov, Fiz. Tv. Tela 8, 3280, 1966.
41. J. E. Caffin, T. L. Goodfellow, A. J. Hamdani, Mater. Res. Bull. 2, 1067, 1967.
42. L. B. Zuev, G. E. Turcsinovics, Fiz. Tv. Tela 10, 2811, 1968.
43. L. B. Zuev, G. E. Turcsinovics, N. P. Gudimova, Fiz. Tv. Tela 11, 806, 1968.
44. W. A. Brantley, C. L. Bauer, Phil. Mag. 20, 441, 1969.
45. V. I. Alsic, D. G. Drijajev, V. A. Melik-Sahnazarov, Elektronnije i ionnije processzi v tverdih telah VI. „Meeniereba“, Tbiliszi, 1973, 68. old.
46. D. G. Drijajev, V. A. Melik-Sahnazarov, D. M. Budziasvili, Fiz. Tv. Tela 13, 3471, 1971.
47. R. M. Turner, R. W. Whitworth, Phil. Mag. 18, 531, 1968.
48. N. V. Zagorujko, V. I. Szavenko, N. N. Bekkauer, Piszma v ZsETF 14, 283, 1971.
49. N. V. Zagorujko, V. I. Szavenko, N. N. Bekkauer, Fiz. Tv. Tela 14, 2450, 1972.
50. E. P. Belozerova, N. A. Tyapunina, Fiz. Tv. Tela 13, 3074, 1971.
51. W. W. Walker, L. J. Demer, Phys. stat. sol. 29, K 141, 1968.
52. L. B. Zuev, O. K. Carev, V. E. Gromov, V. A. Ribjancev, Izv. Viszs. Ucs. Zav., Fizika, No 3, 61, 1974.
53. R. W. Whithworth, Phil. Mag. 10, 801, 1964.
54. A. Hikata, C. Elbaum, B. Chick, R. Truell, J. Appl. Phys. 34, 2154, 1963.
55. J. E. Caffin, T. L. Goodfellow, Proc. Phys. Soc. 79, 1285, 1962.
56. C. H. Dupuy, B. Schaeffner, Proc. Br. ceram. Soc. 6, 257, 1966.
57. C. H. S. Dupuy, Theses, Universite de Strasbourg, 1965.
58. Turcsányi Gy., Mátrai M., Tarján I., Krisztallográfia 13, 717, 1968.
59. A. Huddart, Ph. D. Thesis, University of Birmingham, 1971.
60. V. L. Indenbom, Személyes közlés, 1976.
61. Sz. Sz. Smurak, Fiz. Tv. Tela 10, 1934, 1968.
62. F. D. Szencsukov, Kandidátusi disszertáció, Csernogolovka, 1973.
63. V. V. Korsunov, F. D. Szencsukov, Sz. Z. Smurak, Piszma v ZsETF, 13, 408, 1971.
64. V. L. Boncs-Bruevics, V. B. Glaszko, Fiz. Tv. Tela 3, 36, 1961.
65. V. L. Boncs-Bruevics, Fiz. Tv. Tela 3, 47, 1961.
66. E. A. Kaper, E. P. Feldman, ZsETF 61, 419, 1971.
67. Sz. A. Gredeszku, I. I. Simon, E. P. Feldman, ZsETF 62, 789, 1972.



68. C. W. Deutsche, J. Chem. Phys. 57, 4002, 1972.
69. M. V. Ortenburg, Phys. stat. sol. (b) 60, 531, 1973.
70. J. S. Nadau, J. Appl. Phys. 35, 669, 1964.
71. J. Deputat, Z. Pawlowski, Bull. Acad. Polon. sci. ser. techn. 13, 69, 1965.
72. G. A. Jermakov, E. M. Nadgornij, Pisma v ZsETF 14, 45 1971.
73. N. Ja. Gorigkyo, N. N. Novikov, Fiz. Tv. Tela 12, 1268, 1971.
74. N. N. Novikov, O. V. Rudenko, Ukr. Fiz. Zs. 18, 508, 1973.
75. G. A. Jermakov, E. M. Nadgornij Fiz. Tv. Tela 14, 1277, 1972.
76. J. M. Cabrera, F. Agulló-López, J. Appl. Phys. 45, 1013, 1974.
77. M. M. Novikov, Ukr. Fiz. Zs. 20, 1027, 1975.
78. G. A. Jermakov, E. M. Nadgornij, Izv. Ak. Nauk, Szer. Fiz. 37, 2404, 1973.
79. G. A. Jermakov, E. M. Nadgornij, Dokladi Ak. Nauk 181, 76, 1968.
80. G. A. Jermakov, E. M. Nadgornij, Izv. Ak. Nauk, Szer. Fiz. 35, 1422, 1971.
81. J. Deputat, Z. Pawlowski, Proceedings of the 7-th Int. Congress on Acoustics Budapest, 1971 Aug. 18—26. Bp. Akadémiai Kiadó. 1971.
82. G. A. Jermakov, E. V. Korovkin, Ja. M. Szojfer, Fiz. Tv. Tela 15, 1911, 1973.
83. G. A. Jermakov, E. V. Korovkin, Ja. M. Szojfer, Fiz. Tv. Tela 16, 1756, 1974.
84. N. I. Bucko, I. C. Oszipisin, Ukr. Fiz. Zs. 13, 1950, 1968.
85. M. M. Novikov, M. Ja. Gorigkyo, Ukr. Fiz. Zs. 18, 902, 1973.
86. G. C. Kuczynski, R. F. Hofman, Phys. Rev. 108, 946, 1957.
87. Ju. A. Oszipjan, I. B. Szavcsenko, Pisma v ZsETF 7, 130, 1968.
88. L. Carlsson, C. Svensson, Solid State Commun. 7, 177, 1968.
89. L. Carlsson, C. Svensson, J. Appl. Phys. 41, 1652, 1970.
90. C. N. Ahlquist, M. J. Carroll, P. Stroempl, J. Phys. Chem. Solids 33, 337, 1972.
91. Ju. A. Oszipjan, V. F. Petrenko, I. B. Szavcsenko, Pisma v ZsETF 13, 622, 1971.
92. L. Carlsson, J. Appl. Phys. 42, 677, 1971.
93. Ju. A. Oszipjan, J. B. Szavcsenko, Fiz. Tv. Tela 14, 1993, 1972.
94. Ju. A. Oszipjan, V. F. Petrenko, ZsETF 63, 1735, 1972.
95. E. J. Sharp, D. A. Avery, Phys. Rev. 158, 511, 1967.
96. G. R. McClurg, C. F. Squire, J. Chem. Phys. 51, 631, 1963.
97. H. C. Gatos, M. C. Finn, M. C. Lavine, J. Appl. Phys. 32, 1174, 1961.
98. R. K. Mueller, R. L. Jacobson, J. Appl. Phys. 33, 2341, 1962.
99. R. L. Bell, R. Latkowski, A. F. Willoughby, J. Mat. Sci. 1, 66, 1966.
100. R. L. Bell, A. F. W. Willoughby, J. Math. Sci. 5, 198, 1970.
101. F. Buch, C. N. Ahlquist, J. Appl. Phys. 45, 1756, 1973.
102. Ju. A. Oszipjan, V. F. Petrenko, ZsETF 69, 1362, 1975.
103. Ju. A. Oszipjan, V. F. Petrenko, Dokl. Ak. Nauk 226, 803, 1976.
104. Ju. A. Oszipjan, Vesztnik Ak. Nauk. No. 4, 32, 1972.
105. H. F. Mataré, Defect Electronics in Semiconductors Wiley-Interscience, John Wiley and Sons, Inc. New York, 1971.
106. M. Faraday, Ekszperimentalnije issledovanyije po elektricesztvu I. §. 284 Moszkva, 1947.
107. M. I. Kornfeld, Fiz. Tv. Tela 13, 474, 1971.
108. M. I. Kornfeld, Fiz. Tv. Tela 16, 3385, 1974.
109. M. I. Kornfeld, Uszp. Fiz. Nauk 116, 327, 1975.
110. Sárközi J., Voszka R., Phys. stat. sol. (a) 36, K 105, 1976.
111. A. G. Ivanov, V. N. Minyeev, E. Z. Novickij, V. A. Janov, G. I. Bezrukov, Pisma v ZsETF 2, 353, 1965.
112. R. K. Linde, W. J. Murri, D. G. Doran, J. Appl. Phys. 37, 2527, 1966.
113. Ju. N. Tyunyaev, V. N. Minyeev, A. G. Ivanov, E. Ju. Guzsmasz, Fiz. Tv. Tela 11, 3048, 1969.
114. Ju. N. Tyunyaev, A. A. Uruszovszkaja, V. N. Minyeev, A. G. Ivanov, Fiz. Tv. Tela 10, 3399, 1968.
115. I. Y. Wong, R. K. Linde, R. M. White, J. Appl. Phys. 40, 4137, 1969.
116. V. N. Minyeev, Ju. N. Tyunyaev, A. G. Ivanov, E. Z. Novickij, Ju. V. Liszicin, ZsETF 53, 1242 1967.
117. C. D. Clark, J. H. Crawford, Adv. Phys. 22, 117, 1973.
118. Ja. J. Frenkel, T. A. Kontorova, ZsETF 8, 89, 1240 és 1349, 1938; Ja. J. Frenkel, Vvegyenije v teoriju metallov, Fizmatgiz, Moszkva, 1958.
119. A. M. Stoneham, J. Phys. C. Solid State Phys. 7, 871, 1974.
120. A. M. Koszevics, V. D. Nacik, ZsETF 51, 1207, 1966.



121. *J. Takamura, T. Morimoto*, J. Phys. Soc. Jap. 18, Suppl. I, 28, 1963.
122. *T. Kaneda*, J. Phys. Soc. Jap. 28, 1205, 1970.
123. *A. I. Landau*, Fiz. Tv. Tela 4, 2733, 1962.
124. *B. Ja. Ljubov, G. M. Csernizer*, Dokl. Ak. Nauk. 161, 1324, 1965.
125. *B. Ja. Ljubov, G. M. Csernizer*, Dokl. Ak. Nauk. 164, 1037, 1965.
126. *G. M. Csernizer*, Izv. Viszs. Ucs. Zav. Ser. Csern. Metall No. 9, 146, 1965.
127. *Prékopa András*, Valószínűségelmélet, Műszaki Könyvkiadó, Budapest. 1962.
128. *Williams, F. E., Hebb M. H.*, Phys. Rev. 84, 1181, 1951.
129. *J. H. Van Vleck*, Phys. Rev. 74, 1168, 1948.
130. *M. Lax*, Journ. Chem. Phys. 20, 1752, 1952.
131. *R. C. O'Rourke*, Phys. Rev. 91, 265, 1953.
132. *R. Kubo, Y. Toyozawa*, Prog. Theoret. Phys. (Kyoto) 13, 160, 1955.
133. *H. J. G. Meyer*, Physica 21, 253, 1955.
134. *J. J. Markham*, Rev. Mod. Phys. 31, 956, 1959.
135. *C. H. Henry, S. E. Schnatterly and C. P. Slichter*, Phys. Rev. 137, A 583, 1965.
136. *G. Chiarotti, U. M. Grassano and R. Rosei*, Phys. Rev. Lett. 17, 1043, 1966.
137. *C. R. Rhyner, J. R. Cameron*, Phys. Rev. 169, 710, 1969.
138. *U. M. Grassano, G. Margaritondo and R. R. Rosei*, Phys. Rev. 2B, 3319, 1970.
139. *R. J. Glauber*, Phys. Rev. Lett. 10, 84, 1963.
140. *R. J. Glauber*, Phys. Rev. 130, 2579, 1963.
141. *R. J. Glauber*, Phys. Rev. 131, 2766, 1963.
142. *E. S. Schrödinger*, Naturwiss. 14, 664, 1926.
143. *J. R. Klauder*, Journ. Math. Phys. 4, 1055, 1963; 5, 177, 1964.
144. *J. A. Malkin, V. J. Manyko*, Preprint PhIAH No.15, 1971.
145. *Von Neumann J.*, Mathematische Grundlagen der Quanten Mechanik, Berlin 1932.
146. *J. P. Hirth, J. Lothe*, Theory of Dislocations, McGraw-Hill Book Comp. New York 1968.
147. *I. Kovács, L. Zsoldos*, Dislocations and Plastic Deformation. Akadémiai Kiadó Budapest, 1973.
148. *J. D. Eshelby*, Proc. Phys. Soc. B62, 307, 1949.
149. *R. Bulloch, B. A. Bilby*, Proc. Phys. Soc. B67, 615, 1954.
150. *J. Weertman*, High Velocity Dislocations; Response of Metals to High Velocity Deformation, Eds. P. G. Shewman, V. F. Zackay Intersci Publ. Inc. New York. 1961. p. 205.
151. *J. Weertman*, Phys. Rev. 119, 1871, 1960.
152. *R. De Batist*, Internal Friction and Defects near Dislocations; Defects and their structure in Nonmetallic Solids Eds.: B. Henderson, A. E. Hughes. Plenum Publ. Corp., New York. 1976.
153. *F. Seitz*, Rev. Mod. Phys. 23, 328, 1951.
154. *J. D. Eshelby, C. W. A. Newey, P. L. Pratt, A. B. Lidiard*, Phil. Mag. 3, 75, 1958.
155. *I. M. Lifsic, Ja. E. Geguzin*, Fiz. Tv. Tela 7, 62, 1965.
156. *I. M. Lifsic, A. M. Koszevics, Ja. E. Geguzin*, 243—263. old. Poverhnozshaja diffuzija i rasztekanyije, Nauka Moszkva. 1969.
157. *A. R. C. Westwood*, 553. old. Eds.: D. C. Drucker, J. J. Gilman, Fracture of Solids, Interscience, New York. 1963.
158. *J. M. Hedges, J. W. Mitchell*, Phil. Mag. 44, 223, 357, 1953.
159. *R. W. Whithworth*, Phil. Mag. 11, 83, 1965.
160. *H. K. Birnbaum*, Res. Group U. K. Atomic Energy AERE 5944/2 1968.
161. *W. A. Brantley, Ch. L. Bauer*, Phys. stat. sol. 18, 465, 1966.
162. *V. M. Csernov*, Kandidátusi disszertáció, Moszkva. 1972.
163. *Ju. V. Kornysin*, Fiz. Metallow; Metallovedenije 29, 659, 1970.
164. *Voszka R., Tarján I., Berkes L., Krajsovszky J.*, Kristall und Technik 1, 423, 1966.
165. *Voszka R., Raksányi K., Berkes L.*, Kristall und Technik 5, 409, 1970.
166. *Tarján I.*, Magyar Fizikai Folyóirat 25, 41, 1977.
167. *Turchányi Gy., Mátrai M., Tarján I.*, Krisztallográfia 13, 717, 1968.
168. *Turchányi Gy., Janszky J., Földvári I., Tarján I.*, Krisztallográfia, 24, 324, 1979.
169. *Turchányi Gy., Mátrai M., Janszky J., Tarján I.*, Acta Techn. Hung. 80, 61, 1975.
170. *Turchányi Gy., Tarján I.*, Acta Phys. Hung. 28, 291, 1970.
171. *Turchányi Gy., Janszky J., Mátrai M., Tarján I.*, Phys. stat. sol. 38, K 35, 1970.
172. *Turchányi Gy., Mátrai M., Janszky J., Tarján I.*, J. de Phys. C 9, 34, 261, 1973.
173. *Turchányi Gy., Mátrai M., Janszky J., Tarján I.*, Acta Phys. Hung. 35, 193, 1974.
174. *R. Mollwo*, Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, II. Math-Phys. KI, 97, 1931.
175. *H. F. Ivey*, Phys. Rev. 72, 341, 1947.
176. *J. S. Jacobs*, Phys. Rev. 93, 993, 1954.



177. C. J. Buchenauer, D. B. Fitchen, Phys. Rev. 167, 846, 1968.
178. C. Z. van Doorn, Doktori disszertáció 1962.
179. W. B. Fowler, Phys. Rev. 135, A1725, 1964; 151, 657, 1966.
180. S. E. Schnatterly, Phys. Rev. 140, A1364, 1965.
181. W. Gebhardt, K. Maier, Phys. stat. sol. 8, 303, 1965.
182. C. H. Henry, C. P. Slichter: Ed. W. B. Fowler, Physics of Color Centers, Academic Press, New York, 1968. p. 351.
183. J. D. Eshelby, W. T. Read, W. Shockley, Acta Met. 1, 251, 1953.
184. Y. T. Chou, J. Appl. Phys. 34, 429, 1963.
185. H. B. Huntington, Solid state physics 7, 213, 1958.
186. A. Maradudin, Solid state physics 18, 273, 1966; 19, 1, 1967.
187. M. V. Klein: Ed. W. B. Fowler, Physics of Color Centres Academic Press, New York, 1968. p. 430.
188. G. Benedek, 181. old. „Fizika primesznih centrov v kristallah” Tallin, 1972.
189. H. Bateman, A. Erdélyi, Tables of Integral Transforms I, McGraw-Hill Book Co. New York, 1954.
190. H. Bateman, A. Erdélyi, Higher Transcendental Functions II. McGraw-Hill Book Co. New York, 1953.
191. Ju. Ja. Jusin, J. Janszky, Acta Phys. Hung. 41, 3, 1976.
192. R. Strumane, R. De Batist, Phys. stat. sol. 3, 1387, 1963.
193. V. I. Alsic, Fiz. Tv. Tela, 11, 1336, 1969.
194. Turchányi Gy., Mátrai M., Tarján I., Revue Roum. Phys. 13, 59, 1968.
195. Pődör B., A szilárdtestkutatás újabb eredményei 1. kötet, szerk.: Pataki György, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1976. 153. old.
196. A. F. Yoffe, Z. Phys. 22, 286, 1924.
197. M. Bonciano, U. M. Grassano, Phys. Stat. Sol. (b) 67, 371, 1975.
198. Turchányi Gy., Janszky J., Mátrai M., Tarján I., Krisztallografija 17, 426, 1972.
199. Gaál I., Személyes közlés. 1978.
200. J. Friedel, Dislocations, Pergamon Press, Oxford, 1964.
201. Janszky J., Fiz. Tv. Tela 15, 3705, 1973.
202. Janszky J., Turchányi Gy., Nyomás alatt.
203. Turchányi Gy., Janszky J., Mátrai M., Tarján I., O diszlokacionnoj fotoprovodimosztyi; Materiali pjatogo vszeszojuznogo szimpoziuma po mechanoemisszii i mehanohimii tverdih tel, I. Tallinn 1977. 199. old.
204. Janszky J., Krisztallografija 19, 1113, 1974.
205. Janszky J., J. Phys. Chem. Sol.-nál közlésre elfogadva.





# AZ ÓRIÁSZREZONANCIÁK KÍSÉRLETI VIZSGÁLATA KÖNNYŰ MAGOKBAN: MAKROSZKOPIKUS ÉS MIKROSZKOPIKUS VONATKOZÁSOK\*

CLAUS U. MAYER-BÖRICKE

Institute for Nuclear Physics of Kernforschungsanlage Jülich  
D-517 Jülich, BRD

## ÖSSZEFOGLALÁS

Óriászrezonancia kísérletekről, elsősorban az E2 erősségeknek a könnyű magokban való eloszlására vonatkozó mérésekről számolunk be, de diszkutáljuk még az E3 és E4 módusokat is. Korábbi kísérletekkel szemben a könnyű magok ( $A \leq 28$ ) magasabb bemenő  $\alpha$ -energiákon kapott ( $\alpha, \alpha'$ ) spektrumai közvetlen bizonyítékot szolgáltatnak koncentrált óriás kvadrupól rezonanciák (GQR) létezésére. Az óriászrezonanciák tulajdonságait a makroszkopikus és mikroszkopikus elemzések szempontjából tárgyaljuk.

- A) Az ( $\alpha, \alpha'$ ) spektrum módszer kísérleti vonatkozásai: Részletesen áttekintjük a GQR  $^{24}, ^{25}, ^{26}\text{Mg}$  és  $^{27}\text{Al}$  magokban különböző bemenő  $\alpha$ -energiákkal történő gerjesztését. Kitérünk arra, hogy miért lehetett a GQR-t csupán magasabb  $E_x$  esetén detektálni. Diszkutáljuk a GQR kísérletileg meghatározható tulajdonságait (erősség, szerkezet és háttér), valamint az óriászrezonancia (GR) szögeloszlások makroszkopikus DWBA analízisének eredményeit. Megmutatjuk, hogy az ( $\alpha, \gamma$ ) munkával kapcsolatos ellentmondásokat fel lehet oldani.
- B)  $^{16}\text{O}$  és  $^{12}\text{C}$ : A rugalmatlan alfa-szórás segítségével kísérletileg meghatározott tulajdonságokat a mikroszkopikus modellek szempontjából tárgyaljuk, különös tekintettel az erősségre, szerkezetre és gerjesztési energiára vonatkozó eredményekre.
- C) GQR az sd-héjban távol a zárt héjú magoktól: A kísérleti eredményeket olyan jelenleg alkalmazott mikroszkopikus modell számítások keretében tárgyaljuk, melyek törzs- és valencia nukleon-gerjesztéseket tételeznek fel a  $^{20}, ^{22}\text{Ne}$ -re,  $^{28}\text{Si}$ -re és az  $^{16}\text{O}$  körüli magokra.
- D) Az óriászrezonanciák vizsgálata a gerjesztési függvény módszerrel: Beszámolunk annak a  $^{24}\text{Mg}(p, p')$  kísérletnek az eredményeiről, melyben az alacsonyan fekvő  $3^+$  állapotot gerjesztették. A különböző bemenő energiákra kapott szögeloszlásokat a kétlépéses makroszkopikus törzs-gerjesztési modellel analizáljuk. A vizsgálatok a  $^{24}\text{Mg}$  óriás kvadrupól rezonanciájában levő szerkezet létezését mutatják, mely jó egyezésben van a spektrum módszerrel kapott eredményekkel (lásd (A)).
- E) Evidenciát mutatunk be egy olyan új rezonanciára (E3 erősség koncentráció), mely a GQR-nál kisebb energiánál van. Az evidencia  $^{27}\text{Al}$ -re ( $\alpha, \alpha'$ ) kísérletekből következik.
- F) A GQR részecskebomlása  $^{16}\text{O}$ -ban: Koincidencia kísérleteket végeztünk abból a célból, hogy az ( $\alpha, \alpha'$ ) folyamatban gerjesztett GQR részecskebomlását tanulmányozzuk. Megmutatjuk, hogy a GQR lényegében  $\alpha$ -emisszióval bomlik.

## I. BEVEZETÉS

### 1.1. Az előadás tárgya

Ebben az előadásban át kívánok tekinteni néhány olyan újabb kísérletet, melyek az  $A \leq 28$  tömegű könnyű magok új óriászrezonanciáira vonatkoznak.

Mindenekelőtt, érdemes felhívni a figyelmet arra, hogy az E2 óriás kvadrupól rezonancia (GQR) létezését sokan különböző kísérleti eredmények alapján [1, 2, 3]

\* Az előadás 1977 nyarán a balatonfüredi „Magreakció modellek 77” nemzetközi szimpozionon hangzott el.



tagadják az említett magokra. Ezzel az állásponttal szemben bizonyító eredményeket fogok bemutatni arra vonatkozólag, hogy E2 óriás rezonanciák ezekben a könnyű magokban is léteznek és kísérletileg meghatározott tulajdonságaik elméletileg jól leírhatók. Az előzőeken kívül megtárgyalásra kerülnek a legújabb evidenciák is az E3 és a valószínűleg E4 óriásrezonanciaszerű erősség koncentrációkkal kapcsolatban. Végül pedig a GQR részecskebomlására vonatkozó néhány kísérleti eredményről kívánok beszámolni.

Az előadásra rendelkezésemre álló időben nem adhatok teljes áttekintést a kutatási területen végzett összes munkáról. Ehelyett elsősorban néhány újabb, Jülichben végrehajtott kísérletet ismertetek, és utalok az ide vonatkozó elméleti számításokra. Örömmre szolgál bejelenteni, hogy ezen munkák egy részét budapesti és heidelbergi fizikusokkal kooperációban végeztük.

A kísérleti munkát a nagy izokronus ciklotronunkkal, a JULIC-kel hajtottuk végre, mely többek között olyan alfa és proton nyalábok előállítására alkalmas, melyek energiája  $90 \leq E_\alpha \leq 180$  MeV, illetőleg  $22,5 \leq E_p \leq 45$  MeV tartományokban folytonosan változtatható. Ezeket a nyalábokat használtuk arra, hogy az óriásrezonanciákat (Giant resonances — GR) rugalmatlan szórásban gerjesszük.

Mielőtt kísérleti részletekbe bocsátkoznék, rövid bevezetést szeretnék adni az óriásrezonanciák természetére vonatkozólag mind makroszkopikus, mind mikroszkopikus szemléletmódból kiindulva.

## 1.2. Makroszkopikus modellek

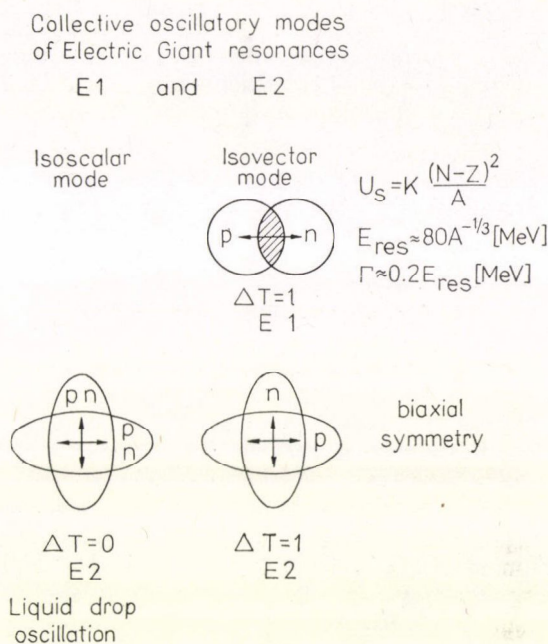
Az óriásrezonanciákat Baldwin és Klaiber fedezték fel 1947-ben fotonukleáris reakciókban [4] és legelőször mint makroszkopikus magoszillációkat értelmezték úgy, ahogyan azt az 1. ábra felső része mutatja. Ebben az egyszerű megközelítésben az elektromos óriás dipól rezonanciát (GDR) úgy magyarázzuk, hogy a protoneloszlás mint egész oszcillál a neutroneloszlással szemben. Egy ilyen vibrációnak a frekvenciája nagy lesz, minthogy az a protonoknak a hozzájuk erősen kötött neutronoktól való részleges szeparációjából származik. A visszatérítő erőt az  $U_s$  szimmetriapotenciál szolgáltatja, mely a lehető legnagyobb átfedést igyekszik létrehozni a proton és a neutron eloszlások között.

Goldhaber és Teller [5] két modellt tárgyaltak: (1) proton gömb oszcillál egy neutron gömbszel szemben (1. ábra) és (2) sűrűség-oszcillációk vannak a proton és neutron folyadékban a mag belsejében úgy, hogy közben az egész mag gömb alakja megőrződik. Az utóbbi modell, melyet Steinwedel és Jensen [6] dolgoztak ki, vezet a GDR energiájára vonatkozó közismert formulára ( $E_{\text{res}} = 80 \cdot A^{-1/3}$  (MeV)). A rezonancia kiszélesedését, melyet kísérletileg 3–6 MeV között változónak találtak, Goldhaber és Teller feltételezése szerint a rendes dipól vibrációinak a magmozgások más módusaihoz való csatolódása okozza.

A továbbiak során Steinwedel és Jensen úgy érvelnek, hogy mikroszkopikus megközelítésben egy olyan magmodell kellene találni, melyben a protonoknak a neutronokkal szembeni vibrációja jól meghatározott kvantumállapotoknak, azaz részecskegerjesztéseknek felel meg. Más típusú részecskegerjesztésekhez való csatlódás ezeket az eredeti állapotokat számos olyan nívóra hasítja fel, melyek közül mindegyiknek a részecskebomlásnak megfelelő saját szélessége van. A makroszkopikus kollektív modellben az alacsony energiás felületi vibrációk és rotációk csa-



tolódhatnak a hidrodinamikai nagyfrekvenciás óriás dipól oszcillációkhoz. Ha a csatolás gyenge, akkor azok a magnívók, melyek ténylegesen hozzájárulnak az óriásrezonancia erősség eloszlásához, az idealizált óriásrezonancia vibráció eredeti állapotai körül fognak csoportosulni.



1. ábra

A GDR kísérleti felfedezése után más multipolaritású óriásrezonanciák létezésének lehetőségét is diszkutálták. A kollektív mozgás makroszkopikus szemléletében például az óriás kvadrupól rezonanciákat a magok olyan felületi oszcillációinak tekinthetjük, mint amilyeneket az 1. ábra mutat [7].

Lényeges, hogy az óriásrezonanciák két típusát megkülönböztessük: Az izoskalár módusban ( $\Delta T=0$ ) a proton- és a neutroneloszlás fázisban oszcillál a szférikus egyensúlyi alak körül, úgy, hogy a mozgás során kvadrupól típusú deformáció jön létre. Ez egy folyadékcsepp oszcillációihoz hasonlít. Másrészt, az izovektor módusban ( $\Delta T=1$ ) a proton- és neutroneloszlások egymással szemben, vagyis ellentett fázisban oszcillálnak.

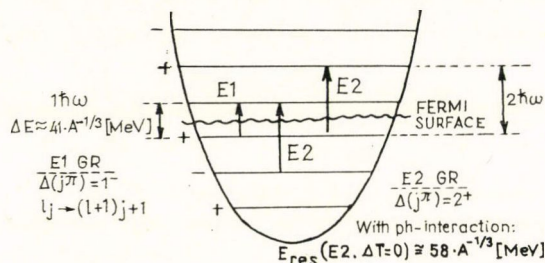
Bármely izoskalár óriás multipólus rezonancia esetén a protonok és a neutronok fázisban oszcillálnak. Ezért izoskalár E1 óriásrezonancia nem fordul elő a természetben  $N=Z$  magokra, hiszen ez egy tiszta translációnak felel meg.

A GQR izovektor módusa magasabb gerjesztési energiájú, mint az izoskalár kvadrupól módus, mivel a proton- és neutroneloszlás szeparációjához további ( $U_s$ ) energiára van szükség.

### 1.3. Mikroszkopikus megközelítés

Ismeretes, hogy a kollektív oszcillációk mikroszkopikusan leírhatók a héjmodell keretén belül.

A tárgyalási mód alapgondolatának kifejtése érdekében tekintsünk egy izotrop harmonikus oszcillátort (2. ábra). Az oszcillátor állapotok között a paritás változik, ezért az E1 módus, melynél paritásváltozás fellép, az összes lehetséges olyan nukleonátmenet eredményének képzelhető el, melyeknél az átmenet az utolsó betöltött héjról a Fermi-nívó feletti első betöltetlen héjra történik. Ez a módus  $1\hbar\omega$  főleg nem spin-flip típusú  $1_j \rightarrow (1+1)_{j+1}$  gerjesztéseknek felel meg. Ezek az átmenetek különböző részecske-lyuk állapotok ( $1p1h$ ) keltését jelentik.



2. ábra

Az oszcillátor héjak közötti energiakülönbség közelítőleg  $\hbar\omega = 41 \cdot A^{-1/3}$  MeV, ezért az E1 óriásrezonancia energiáját 16 MeV-nek várjuk  $^{16}\text{O}$  és 7 MeV-nek  $^{208}\text{Pb}$  esetén. Ezek az energiák azonban 8, illetve 6 MeV-vel alacsonyabbak a kísérletileg meghatározott rezonancia energiáknál.

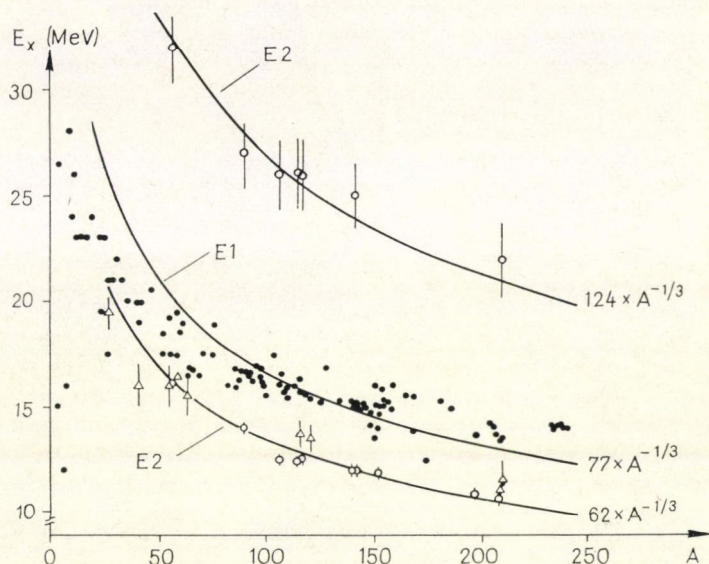
Brown és Bolsterli [9] megmutatták, hogy ez az ellentmondás feloldható, ha figyelembe vesszük a maradék részecske-lyuk ( $ph$ ) kölcsönhatást, mely az összes  $ph$ -komponens koherens interferenciájával egyetlen kollektív állapot kialakulásához vezet. Ez az állapot hordozza a teljes átmeneti erősséget. Továbbmenve, ez az erősen kollektív állapot általában két olyan komponensre hasad fel, melyek energiában erősen el vannak tolódva. A vonzó  $ph$  kölcsönhatás esetében, azaz izoskalár kölcsönhatáskor a megfelelő komponens ( $L > 1$ -re) az alacsonyabb energiákhoz tolódik. A taszító  $ph$  kölcsönhatásra, azaz izovektor esetre a kollektív állapot komponense energiában felfelé változik, úgyhogy a GDR energiára a kísérletekkel való kvalitatív egyezés adódik.

Az E2 óriásrezonancia mikroszkopikus tulajdonságait hasonló módon magyarázhatjuk. Ebben az esetben nincsen paritásváltozás ( $\Delta(j^\pi) = 2^+$ ). A megfelelő részecskeátmenetek a szomszédos páratlan, vagy páros paritású harmonikus oszcillátor állapotok között történnek. Ezért ezek  $2\hbar\omega$  típusúak. Bekapcsolva a  $ph$  kölcsönhatást, ismét az eredeti állapotnak két óriásrezonanciára, egy izoskalár és egy izovektor E2 óriásrezonanciára való felhasadását várjuk. Bohr és Mottelson [10] az izoskalár GQR energiáját valamivel bonyolultabb oszcillátor modell segítségével  $E_{\text{res}}(E2, \Delta T = 0) = 58 \cdot A^{-1/3}$  (MeV) értékűnek jósolták. Végül megemlíjtjük, hogy nem zárt héjú magoknál az alacsony energiájú E2  $ph$  módusok egyetlen héjon belül is gerjeszthetők, ami  $0\hbar\omega$  módust jelent. Ezek csatolódhatnak a  $2\hbar\omega$  módusokhoz.



#### 1.4. Az E1 és E2 óriásrezonanciák kísérletileg talált általános tulajdonságai

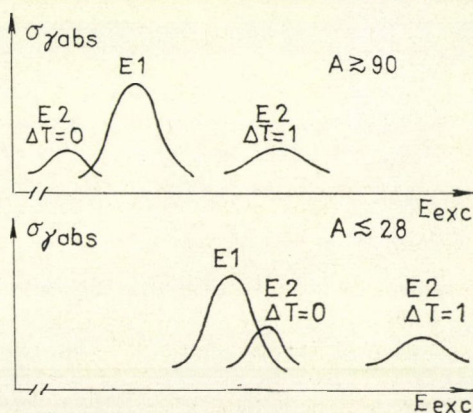
Az 1973 szeptemberéig megmért rezonanciaenergiákat [11] a 3. ábra mutatja be. A GDR (pontok) és a kétfajta kvadrupól rezonancia energiákat (körök és háromszögek) a Bohr—Mottelson-jóslattal hasonlítjuk össze a szereplő paraméterek kis-mértékű (illesztésből származó) megváltoztatása mellett. Látható, hogy akkor még



3. ábra

nem volt adatunk könnyű magok óriás kvadrupól rezonanciáiról. Kitűnik, hogy az elméleti E1 görbe túlságosan meredek a könnyebb magok tartományában. Ezért, ha feltételezzük azt, hogy könnyű magokra létezik GQR, és azt, hogy a rezonancia energia követi a  $62 \cdot A^{-1/3}$  függést, akkor a kísérleti GDR energia metszheti az E2 rezonanciát valamely alacsony A értékre, és a legkönnyebb magokra az alá is kerülhet.

A 4. ábra sematikusan mutatja az E1 és a két E2 óriásrezonancia relatív helyzetét közepesen nehéz magokra és egy lehetséges állapotot könnyű magokra. Nyilvánvaló, hogy a kísérleti eredményeket könnyű magokban nehéz dekomponálni, ha mind az E1, mind pedig az E2 típusú rezonanciák gerjesztődnek, mint pl. az  $(e, e')$  és a  $(p, p')$  kísérletek során.



4. ábra

Ezek szerint az izoskalár GQR vizsgálatakor csak olyan kísérleti módszer alkalmazható, amely szelektív módon éppen ezt az óriásrezonanciát gerjeszti. Ez biztosítva van a rugalmatlan alfa-részecske szórásban, mivel ebben a folyamatban  $\Delta T=0$  és így a  $\Delta T=1$  GDR nem gerjedhet. Ebben az előadásban részletesebben fogok tárgyalni néhány olyan kísérleti eredményt, mely ezt a módszert alkalmazza.

A rezonancia energián és szélességen kívül az óriásrezonancia átmenet különleges erőssége fontos általános vonás. A mért erősséget az összes megfelelő magátmenet teljes erősségére vonatkozó elméleti határ segítségével szokták kifejezni. Általában az energia-súlyozott összegszabály (energy weighted sum rule-EWSR) adta határt alkalmazzák.

E2  $T=0$  erősségre az EWSR határ 0 alapállapotú spinre a makroszkopikus  $\beta_2$  deformáció segítségével a következő összefüggéssel fejezhető ki [12]:

$$\sum_n (E_n - E_0)^2 \beta_2^2(0 \rightarrow n) = \frac{40}{3A} \frac{\hbar^2}{2mR^2},$$

ahol  $E_n$  az izoskalár E2 erősséget hordozó  $n$ -edik állapot energiáját jelöli.  $R$  azon mag ekvivalens uniform tömegeloszlásának a radiusza, melynek ugyanakkora közepes négyzetes sugara van, mint a tényleges alapállapotú sűrűségeloszlásnak [13],

$$R^2 = \frac{5}{3} \langle r^2 \rangle_{\text{g.s.}}$$

A rugalmatlan alfa szórásból kapott kísérleti GQR eredmények analízisére a kollektív modellt alkalmazzuk. Az adatok DWBA analíziséből a makroszkopikus  $\beta_2$  (exp) deformációs paraméter a mért hatáskeresztmetszetnek a DWBA hatáskeresztmetszettel való összevetése útján adódik:

$$\beta_2^2(\text{exp}) = \frac{\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{exp}}}{\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{DWBA}_{L=2}}}.$$

Ezt a kísérleti  $\beta_2$  értéket lehet azután felhasználni annak kiértékelésére, hogy a mért GQR erősség az összegszabály adta határ milyen hányadát meríti ki. Mindazonáltal az alkalmazott feltételezések miatt az összegszabály adta határ általában csak a tényleges ESWR korlát becslésének tekinthető.

## 2. Az $(\alpha, \alpha')$ spektrum módszer kísérleti vonatkozásai

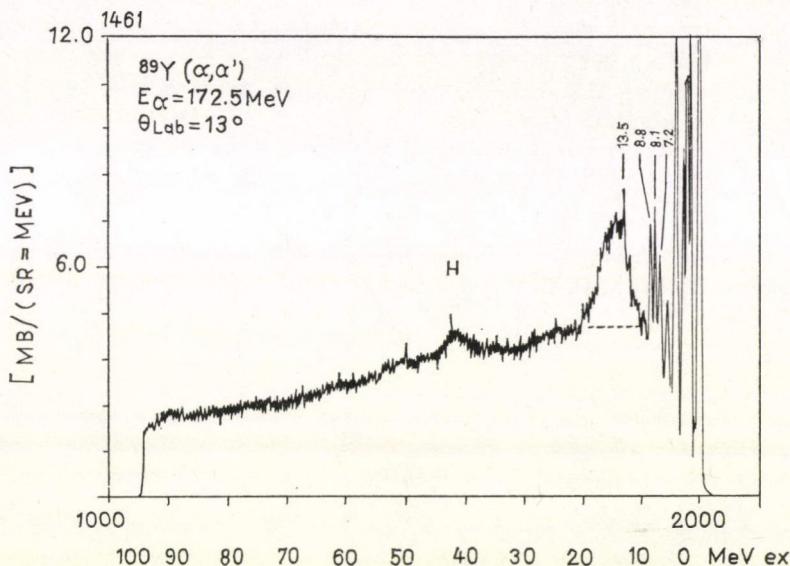
### 2.1. GQR $^{89}\text{Y}$ -ban

Az 5. ábra jó példaként egy középnehéz magra 172,5 MeV bombázó energiánál mutat be egy rugalmatlan alfa spektrumot. 10 és 20 MeV gerjesztési energia között egy széles, izolált csúcs figyelhető meg. Súlypontjának  $E_x \cong 14,5$  MeV energiája közel van a GQR várt  $63 \cdot A^{-1/3}$  (MeV) helyzetéhez. A háttér feletti csúcs félérték-szélessége (FWHM) 4,2 MeV körül van. Ennek a „púpnek” a szögeloszlását jól



visszaadják az  $L=2$  egyetlen multipólátmenettel végrehajtott DWBA számítások. A rezonancia csúcs  $L=2$  átmeneti erőssége az izoskalár EWSR határ kb. 50%-át meríti ki.

Ilyen információ alapján ezt a típusú csúcsot általában izoskalár E2 óriászrezonanciának tekintik. Ez többé vagy kevésbé határozottan sok középnehéz és nehéz magnál megfigyelhető [15].

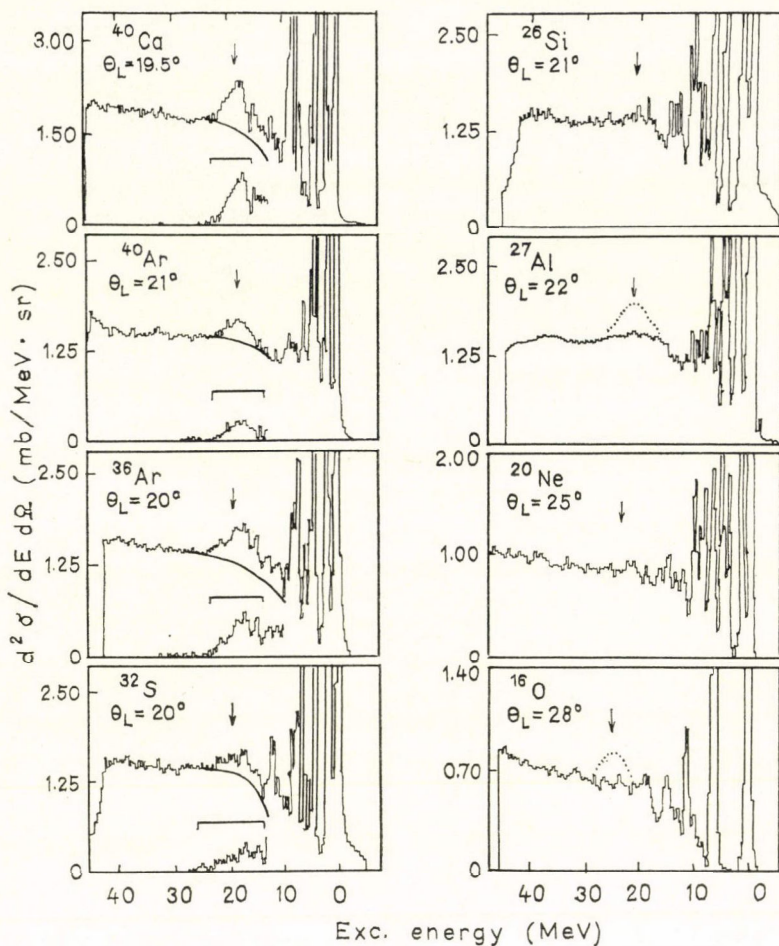


5. ábra

## 2.2. Kvadrupól óriászrezonanciák $^{27}\text{Al}$ -ben és a Mg izotópokban

Az előbbiekkal ellentétben, vannak olyan kísérleti eredmények, melyek arra utaltak, hogy az  $A < 32$  könnyű magokban nem léteznek kvadrupól óriászrezonanciák.

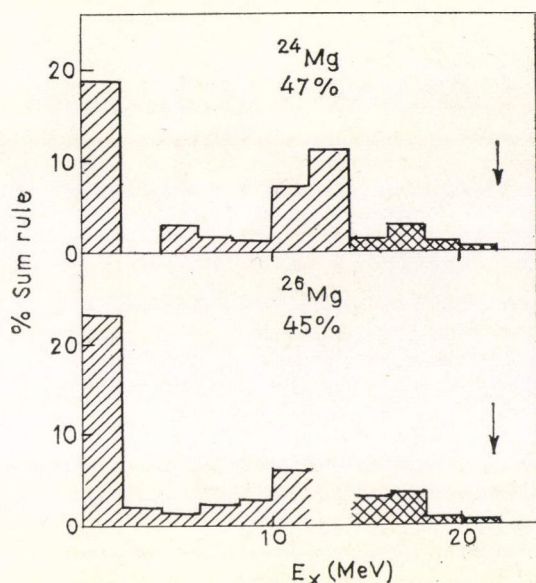
Az előbbi kijelentést támasztja alá a 6. ábra, mely néhány könnyű mag ( $\alpha, \alpha'$ ) spektrumát mutatja 97 MeV bombázó energián [1, 16]. A spektrumokat a Texas A&M laboratóriumban vették fel. Az ábrán bemutatott esetekben a szórási szögek közel vannak az  $L=2$  szögeloszlás várható maximumához. Az óriás kvadrupól rezonancia várható helyzetét a felső nyilak jelölik. A munka szerzői hangsúlyozták, hogy  $A < 32$  könnyű magokra nem figyelhető meg GQR csúcs a spektrumokban. Ebből arra következtettek, hogy  $A \approx 32$  alatt minőségi változás megy végbe és az egy széles csúcsban való, rezonanciaszerű erősség-koncentráció helyett az E2 erősségek egy széles tartományban oszlanak el minden rezonanciaszerű tulajdonság nélkül. Összehasonlításképpen a szerzők az ábrán szaggatott vonallal jelölték azt, hogy mit várhatnánk az  $^{27}\text{Al}$  és  $^{16}\text{O}$  esetében, akkor ha  $\Gamma = 6$  MeV szélességű olyan GQR-t lehetne megfigyelni, melynek erőssége 25%-ra merítené ki az energiasúlyozott összegszabály adta határt.



6. ábra

Az óriás kvadrupól rezonanciának az sd-héj könnyű magjain végrehajtott kísérletekben való meg nem figyelt volta egyezésben látszott lenni az  $(\alpha, \gamma)$  befogási reakciók eredményeivel. Ezek azt mutatták, hogy az E2 erősség egy kb. 15 MeV szélességű energiatartományban oszlik szét [1, 2, 3, 16] és csak igen kicsiny erősség esik arra a tartományra, ahol az óriás kvadrupól rezonanciát a  $63 \cdot A^{-1/3}$  MeV összefüggés alapján várhatjuk. A helyzetet a 7. ábra illusztrálja a Stanfordban tanulmányozott  $^{24}\text{Mg}$  és  $^{26}\text{Mg}$  esetére. Itt az  $(\alpha, \gamma)$  befogási vizsgálatokból meghatározott E2 erősséget (hálós jelölés) az összecsabály adta határ százalékában ábrázolták. Ezenkívül az ábra mutatja még a kötött állapotokra és az alacsony energiájú rezonanciákra vonatkozólag rendelkezésre álló E2 erősség adatokat is. A GQR várható helyzetét a nyilak jelölik. Az erősen fluktuáló hatáskeresztmetszetekeket 2 MeV széles intervallumokra integrálták.





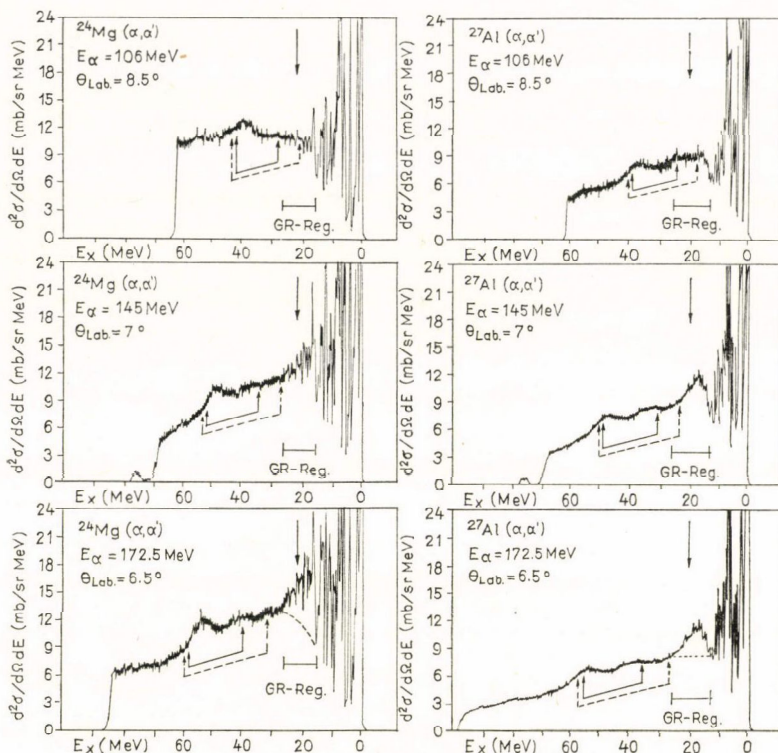
7. ábra

A Texas A&M laboratóriumban  $\sim 100$  MeV-nél kapott eredmények ellentmondásban látszottak lenni a Jülichben lényegesen nagyobb bemenő  $\alpha$  energiákon végrehajtott rugalmatlan szórási kísérletek eredményeivel. Ezekben a vizsgálatokban egy erős csúcsot lehetett megfigyelni az  $\alpha$ -spektrumokban a feltételezett QGR tartományban  $E_x \geq 140$  MeV bemenő  $\alpha$  energiák esetén. Abból a célból, hogy az sd-héj könnyű magjaira fennálló előbbi ellentmondást tisztázzuk, rugalmatlan szórási kísérletsorozatot hajtottunk végre a jülichi Izochronus Ciklotron (JULIC) segítségével olyan bemenő energiákon, melyek 100 és 170 MeV közé estek. Az alapgondolat az volt, hogy az  $(\alpha, \alpha')$  kísérletekben az óriás kvadrupól rezonancia hozamában egy olyan energiafüggés lehet, mely megmagyarázza az egymásnak ellentmondó eredményeket.

A 8. ábra az  $^{27}\text{Al}$ -ra és a  $^{24}\text{Mg}$ -ra mutat be néhány eredményt [18]. A magasabb bemenő energiákra mindegyik spektrum erős gerjesztést mutat az óriásrezonancia tartományban (GR-region).

Az  $^{27}\text{Al}$  esetében egyetlen csúcsot láthatunk egy arra ráülő finomszerkezettel. A  $^{24}\text{Mg}$ -nál az óriásrezonancia tartományban az erősség durva szerkezetet mutat rászuperponálódott finomszerkezettel. Az óriásrezonancia súlypontja az  $^{27}\text{Al}$  spektrumokban (18,5 MeV) valamivel kisebb energiákhoz tolódott, mint ahogy azt a  $63 \cdot A^{-1/3}$  (MeV) törvény alapján várhatjuk (21 MeV, felső nyílak). A csúcs félértékszélessége  $^{27}\text{Al}$ -nál 7,5 MeV körül van. A 106 MeV-nél felvett spektrumok nem mutatják a megfelelő erős gerjedéseket a QGR tartományban. Ez a tény összhangban van a Texas A&M laboratóriumban kapott eredményekkel.

Az óriásrezonancia csúcs mellett az  $^{27}\text{Al}$  spektrum nagy energiájú részében két másik széles szerkezet is megjelenik. Ezek a csúcsok az alacsonyabb gerjesztések felé mozdulnak el csökkenő bombázó energiával. A 106 MeV esetében az alacsonyabb



8. ábra

beleolvad az óriásrezonancia tartományba és ezzel megváltoztatja az esetleges GR-csúcs farkának alakját. Ez az egyik oka annak, hogy az óriásrezonancia tartományban való erősségkoncentrációt ezeknél az alacsonyabb energiáknál nem látták. A két csúcs azoknak a  ${}^5\text{He}$  és  ${}^5\text{Li}$  magoknak az alfa bomlásából származik, melyek az  $(\alpha, {}^5\text{He})$  és  $(\alpha, {}^5\text{Li})$  pick-up reakciókban keletkeztek. A két széles csúcsnak a mozgása megegyezésben van a  ${}^5\text{He}$  (kihúzott alsó nyílak) és a  ${}^5\text{Li}$  (szaggatott alsó nyílak) alfa-bomlására vonatkozó kinematikából számolt határokkal.

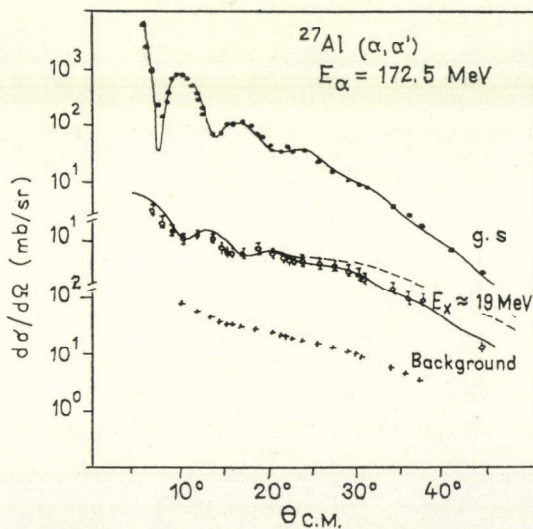
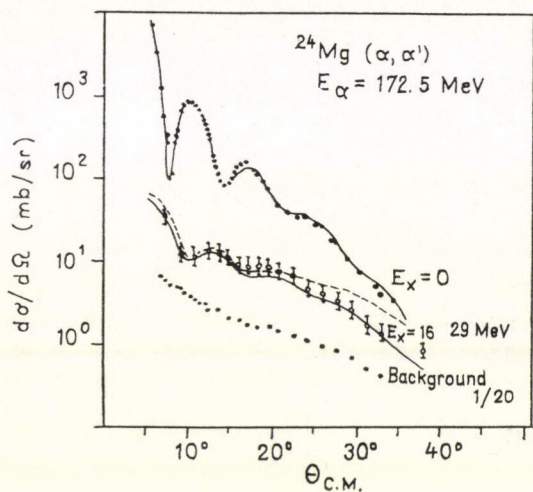
Az óriás kvadrupól rezonancia magasabb bemenő energiákon való megjelenésének másik oka az, hogy a GR hozam növekvő bemenő energiákon nyilvánvalóan növekszik. A háttér megközelítőleg változatlan marad. Az óriásrezonancia hatáskeresztmetszet növekedése a szórási mechanizmus miatt lép fel. Extrapolált optikai modell paraméterek felhasználásával ezt a jelenséget kvalitatív egyezésben levőnek találták DWBA számításokkal [18].

A 172 MeV spektrumokban az óriásrezonancia csúcsokat a szaggatott vonallal jelölt folytonos háttér levonásával értékeltük ki. Meg kell azonban jegyezni, hogy a  ${}^5\text{Li}$  és  ${}^5\text{He}$  alfa-bomláshoz tartozó alacsonyabb csúcsok erősségeket takarhatnak és ezért elválasztó vonalat talán valamivel alacsonyabbra kellene választani.

A 9. ábra az óriásrezonancia szögeloszlását mutatja a két magra. Az adatokat a legjobban  $l=2$  esetre komplex csatolással (cc) számolt DWBA görbékkel lehet

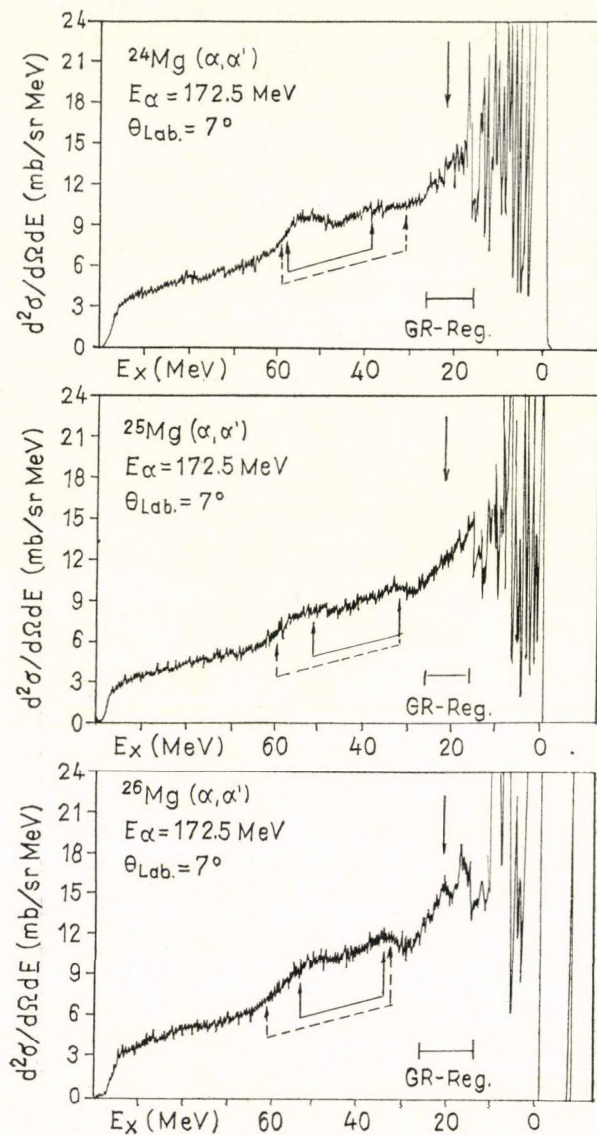


illeszteni. Szaggatott vonalakkal bemutatjuk a valós csatolással (rc) kapott görbékét is. Az adatokkal való egyezés alátámasztja azt a feltételezést, hogy a GR-tartományban talált erős gerjedés alapvetően izoskalár E2 természetű. A felső görbék a rugalmas szórási adatok optikai modell illesztését, az ábrák alsó részében levő pontsor pedig a GR csúcs alatt levont háttérrel mutatják. Az  $^{27}\text{Al}$  és  $^{24}\text{Mg}$  esetében az izoskalár E2 összszabály kimerítettségének mértékére valós csatolás felhasználásával 56%, illetve 43% adódik. Figyelembe véve a becsült hibát megállapíthatjuk, hogy az előbbi számok kb. a 40—70% tartományban vannak.



9. ábra

A 10. ábra a Mg izotópok alfa spektrumát mutatja 172,5 MeV bemenő energián. Mind a három spektrumban erős gerjedés látszik a GR-tartományban. Az erősség azonban felhasad néhány durva és finomszerkezeti csúcsra, melyek száma és helyzete erősen változik  $A$  értékével. A további neutronok jelenlétének hatása szembetűnő és érdekes problémát jelent mikroszkopikus magszerkezeti számítások számára. A  $^{24}\text{Mg}$  és a  $^{25}\text{Mg}$  spektrumok közös vonása, hogy azokban az óriás-

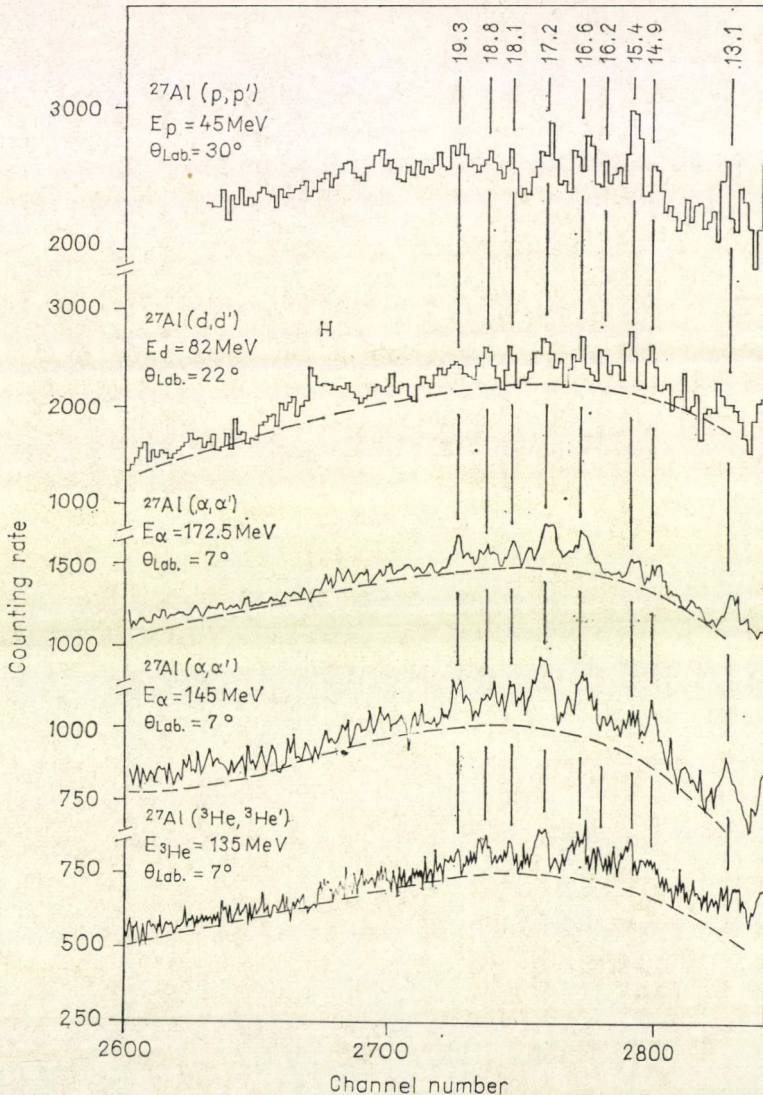


10. ábra



rezonancia gerjesztés burkolója lapos, nagy energiájú farkot mutat, míg az alacsony energiájú tartományt meredek emelkedés jellemzi. A durva szerkezettől eltekintve ez még a  $^{26}\text{Mg}$ -re is igaz.

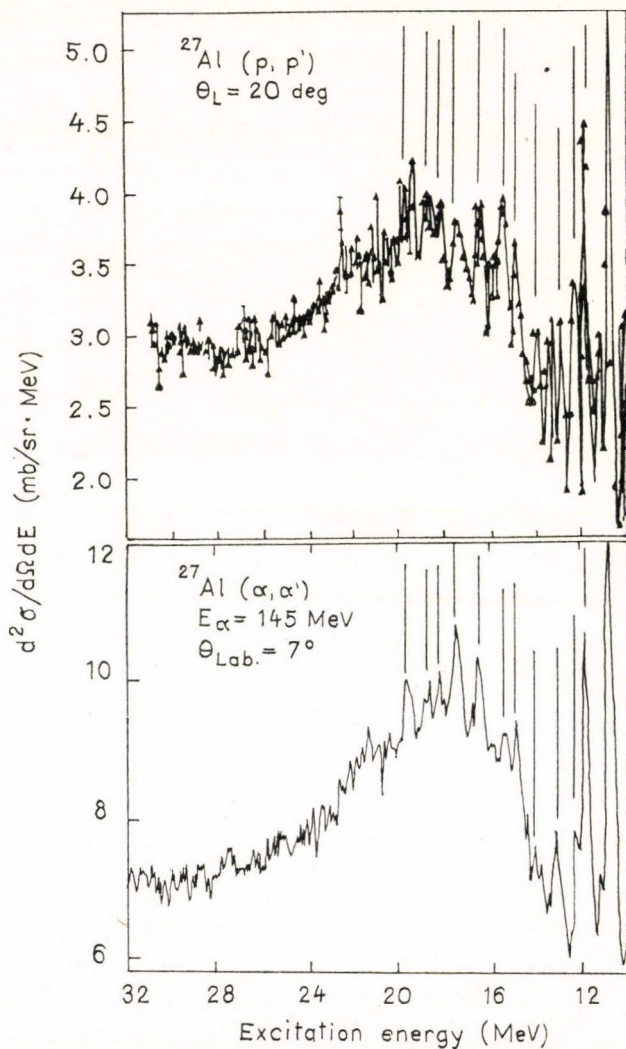
A  $^{24}\text{Mg}$ -ben jelentkező durva szerkezet mellett az  $^{27}\text{Al}$  óriászrezonancia csúcsának finom szerkezete is nagy figyelmet érdemel. A 11. ábra kinagyítva mutatja néhány rugalmatlan szórás spektrum óriászrezonancia részét. Mindenekelőtt megállapíthatjuk, hogy a finomszerkezet mind a két bombázó alfa energián, 145 és 173 MeV-en egyaránt konzisztens módon jelentkezik. Ezenkívül a Jülichben 135 MeV-es energiájú



11. ábra

$^3\text{He}$  bombázó részecskékkel felvett szórási spektrum, valamint az Orsay-ban 82 MeV-en mért ( $d, d'$ ) adatok [19] is ugyanezt a finomszerkezetet mutatják. A  $^3\text{He}$  rugalmatlan szórási folyamatban mind a GQR, mind pedig az ugyanebben az energiatartományban várható GDR is gerjesztődik. Mivel azonban még ebben az esetben is ugyanazt a finom szerkezetet figyelhetjük meg, az óriás dipól rezonancia nyilvánvalóan nem járul mérhetően hozzá a finomszerkezet kialakításához. Ez a tény arra utal, hogy a GDR járuléka gyenge a ( $^3\text{He}, ^3\text{He}'$ ) esetében.

Az előbbi megállapítás még a ( $p, p'$ )-re is igaz, minthogy ebben az esetben is ugyanaz a finomszerkezet jelentkezik (l. 12. ábra). Ez kitűnik akkor, ha az  $E_x =$



12. ábra



= 145 MeV-nél felvett adatainkat az ORNL-en  $E_p = 61$  MeV-en mért  $(p, p')$  adatokkal [15] hasonlítjuk össze. Ebből arra következtethetünk, hogy a  $(p, p')$  GR csúciban is a fő járuléka a GQR-tól származik, míg a GDR ehhez képest kicsi.

Az előbbieket határozottan arra utalnak, hogy a  $(p, p')$  szögeloszlásokat indokoltabb az (1) típusú Goldhaber—Teller (GT) modellben [13], mint a Steinwedel—Jensen-modellben [13] analizálni. Ez egy olyan analízisből levonható következtetés, mely mind a két modellt alkalmazta [15]. Csak a GT megközelítés az, mely a GDR-ra kis hatáskeresztmetszetet ad úgy, hogy a kísérleti hatáskeresztmetszet maradék részét a GQR-nak lehet tulajdonítani.

A GQR-nak itt és az előbbi ábrákon látott finomszerkezete mikroszkopikus modellben diszkutálható. Ez a  $2p\ 2h$  állapotoknak ( $2^+$ ,  $\Delta T = 0$  jellemzőkkel) az eredeti  $1p\ 1h$  állapotokkal való csatolódásából adódhat. A csatolás felhasítja az  $1p\ 1h$  állapotokat és ezért oka lehet a megfigyelt finomszerkezetnek. Másrészről viszont egy deformált potenciálban E2 erősséget hordozó, nagy számú  $1p\ 1h$  állapot lényegében számot adhat a megfigyelt finom szerkezetről.

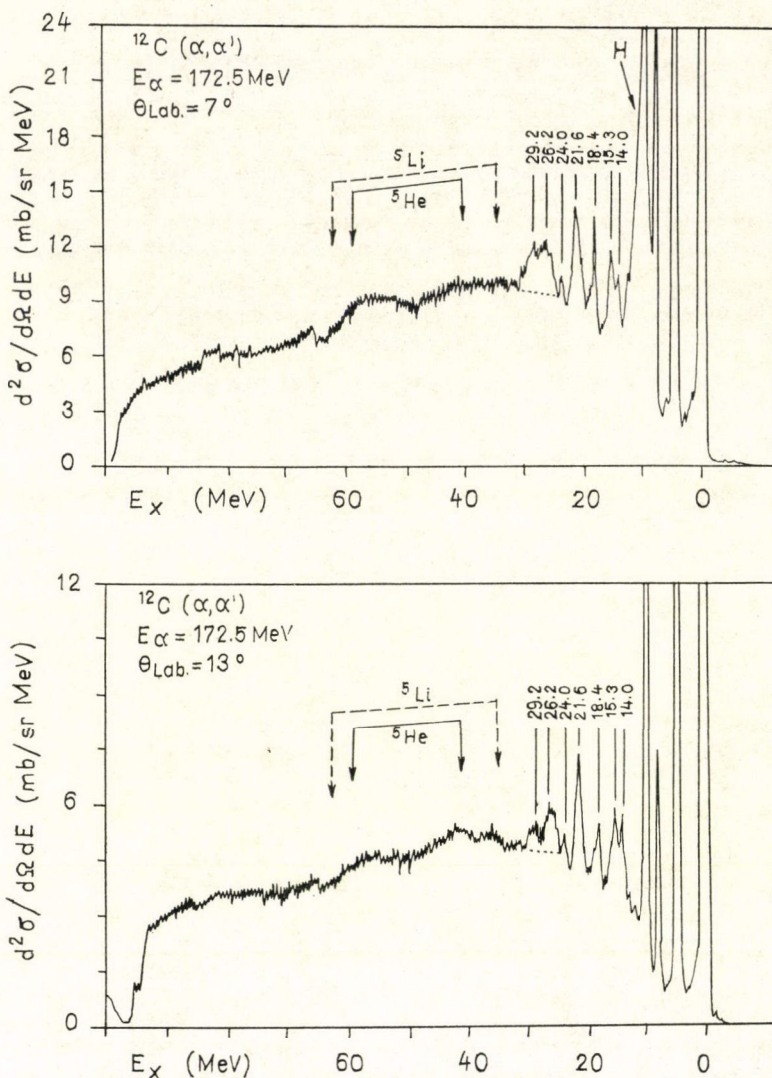
Kísérleti eredményeinket inkább technikai szempontból összefoglalva (a 8.-tól a 12. ábráig) meg kell állapítanunk, hogy a GQR vizsgálata könnyű magokban csak a legnagyobb  $\cong 140$  MeV alfa energiáinkon lehetséges. Az E2 GR hatáskeresztmetszet ugyanis csak ilyenkor nagy úgy, hogy ugyanakkor az alfa bomlási járulékok elegendően messze vannak a GQR-tól ahhoz, hogy a GQR csúcsot megbízhatóan ki lehessen értékelni.

Hátra marad még az a kérdés, hogy miért látható olyan kicsi, rezonancia szerkezet nélküli E2 erősség a GQR tartományban a befogási reakciókban, ahogy azt az előbbieken a  $^{24}\text{Mg}$  esetére bemutattuk [2, 3, 17]. Röviddel ezelőtt a stanfordi csoport a kísérleti gerjesztési függvényeikben mutatkozó erős fluktuációk alapján úgy vélte, hogy ez az alfabefogási reakció főleg hosszú élettartamú compoundmag konfigurációkon keresztül megy végbe. Ha feltételezzük, hogy ez tényleg így van, akkor várhatjuk, hogy ilyen állapotoknak kicsi átfedése van az  $1p\ 1h$  GR állapotokkal. Ezen az alapon megérthető, hogy csupán kevés a hasonlóság az  $(\alpha, \gamma_0)$  és az  $(\alpha, \alpha')$  eredmények között, hiszen az  $(\alpha, \alpha')$  közvetlenül gerjesztheti az 1 részecske, 1 lyuk szerkezetű GQR-t az  $U_{fi}(r)$  egy részecske átmeneti potenciálon keresztül.

### 2.3. E2 és esetleges E4 erősségkoncentráció $^{12}\text{C}$ -ben

Az óriás kvadrupól rezonancia mellett általában E4 erősségkoncentráció fellépte is várható. Amennyiben ez  $2\hbar\omega$  típusú gerjesztés, akkor annak energiája nem nagyon különbözhet a GQR-étől. Láttunk néhány evidenciát a  $^{12}\text{C}$ -ben esetleges E4 erősségkoncentrációra. A 13. ábra két  $^{12}\text{C}$   $(\alpha, \alpha')$  spektrumot mutat be, melyeket  $7^\circ$  és  $13^\circ$ -nál vettünk fel [20]. Az alacsonyabb gerjesztési energiáknál 21,6 MeV-ig ismert  $^{12}\text{C}$  nívókat láthatunk, kivéve a 15,3 MeV nívót, amely ismeretlen. Ott, ahol az E2 óriásrezonancia tartományt várhatjuk (szaggatott vonallal jelöltük az ábrán) nagy hozamot találunk az ábrán, amely azonban sokkal kisebb, mint az  $^{27}\text{Al}$  és a Mg izotópok esetében. Továbbmenve, az is nyilvánvaló, hogy az óriásrezonancia csúcs figyelemreméltóan változik a szöggel, amely arra utal, hogy különböző 1 értékek adják a fő járulékot a 26,2 MeV alsó és a 29 MeV felső szerkezethez.





13. ábra

Kiderült, hogy a lejjebb levő tartomány szögeloszlása tökéletesen leírható egy  $l=2$  DWBA görbével. Másrészt a felső tartomány szögeloszlását illeszteni lehetett olyan  $l=4$  görbével, melyhez 50%  $l=2$  keveredett, azaz valamelyes E4 erősségkoncentráció jelentkezéséről van szó ( $\approx 4\%$  EWSR).

Az E2 izoszkálár energiasúlyozott összesszabályt a két csúcsban levő E2 erősségek összege kevesebb, mint 12%-ra meríti ki (komplex csatolással becsülve), ami sokkal kevesebb, mint az összes többi általunk vizsgált könnyű mag esetében. Való-



színűleg arról van szó, hogy az E2 erősség jelentős része nem csoportosul a két csúcsban, hanem egyenletesen eloszlik a sima háttérben és az óriászrezonancia csúcs körül.

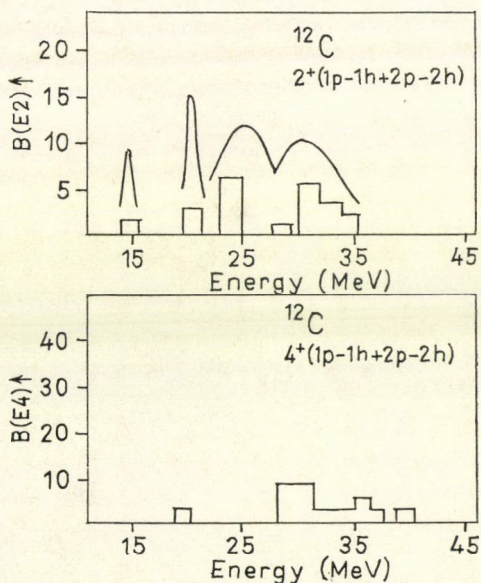
A júlicsi csoport a közelmúltban számításokat [21] hajtott végre a  $^{12}\text{C}$  magon (14. ábra) az úgynevezett törzscsatolt RPA modell keretein belül. Ez lehetőséget nyújt az  $1p\ 1h$  RPA-GR állapotokban a  $2p\ 2h$  konfigurációk közelítő figyelembevételére. Ebben a megközelítésben a  $^{13}\text{N}$  Fermi felület feletti  $\bar{p}$  egyrészcseke állapotait az  $1p\ 1h$  típusú alacsonyan fekvő kollektív törzs-gerjesztési módusokhoz, azaz a  $^{12}\text{C}$  törzs  $2^+$  (4,43 MeV) és  $3^-$  (9,6 MeV) állapotaihoz csatolják. Az eredményül kapott állapotok (a kvázirészecske állapotok) a  $p$  erősséget sok komponensre hasítják fel. Ezek a kvázirészecske állapotok a normális lyuk állapotokhoz csatolódnak, aminek eredményeképpen sok  $1\bar{p}\ 1h+2p\ 2h$  típusú óriászrezonancia állapot keletkezik. Ennek megfelelően a GQR erősség ( $1p\ 1h$  komponensek) felhasad.

A 14. ábra ezeknek a számításoknak az eredményeit mutatja a  $T=0$  E2 és E4 erősségeloszlások burkolói formájában (hisztogram). A 14. ábra felső része a spektrumokban látható hozamot (kihúzott görbék) ábrázolja. Az előzőekben tárgyaltaknak megfelelően a kísérletek széles csúcsokat mutatnak 26 és 29 MeV gerjesztési energiáknál, melyek E2, illetve E2+E4 erősségeket hordoznak. Ez egyezésben van az elmélettel. A többi berajzolt csúcs, mint ahogy azt a DWBA analízis megmutatta, tisztán  $L=2$  erősséget hordoz. Ebből látható, hogy az erősség eloszlásokra vonatkozólag a kísérlet és az elmélet egyezése jó.

Továbbmenve, a számítások az E2  $T=0$  EWSR csupán egy kis töredékét jósolják a két, az óriászrezonancia tartományban megfigyelt  $T=0$  csúcsba. Az elméleti E2 erősségnek nagy része energiában feltolódik és az  $(\alpha, \alpha')$  kísérletben nem látható az óriászrezonancia tartomány felett, elsősorban azért nem, mert sok nívó között szétesztódik úgy, hogy végül eltűnik a folytonos háttérben. Ez különösen érthető, ha figyelembe vesszük, hogy ezeket az állapotokat a részecskekibocsátási szélességük még járulékosan kiszélesíti.

#### 2.4. Az $^{16}\text{O}$ óriász kvadrupól rezonanciája

Más vizsgálatok azt tanulmányozzák, hogy vajon létezik-e izoskalár kvadrupól óriászrezonancia  $^{16}\text{O}$ -ban. A 15. ábra néhány ide vonatkozó  $(\alpha, \alpha')$  spektrumot mutat [22]. A legérdekesebb megfigyelhető tulajdonság a GR hozam erőteljes durva szerkezete 16 és 27 MeV között, melyre finom szerkezet szuperponálódik. Az óriász rezonancia energia közepe 21 MeV, félértékszélessége (FWHM) 7,5 MeV körül van. 18,4 MeV-nél egy erős csúcs is látható a tartományban. Éppen úgy, mint az



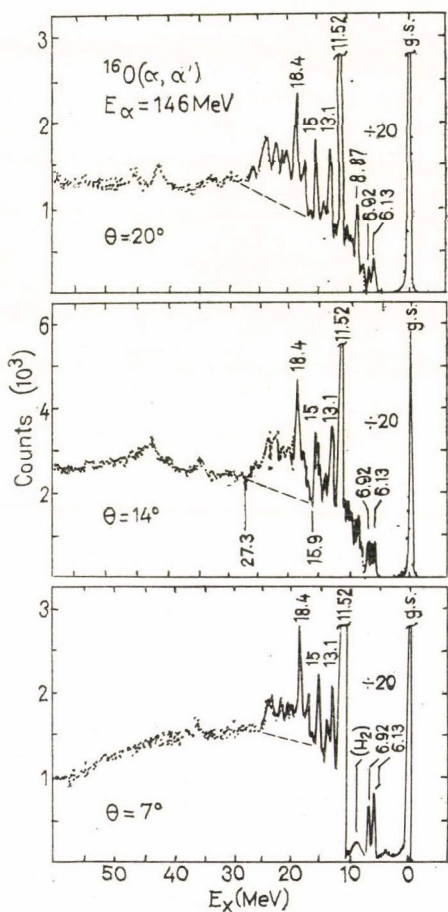
14. ábra



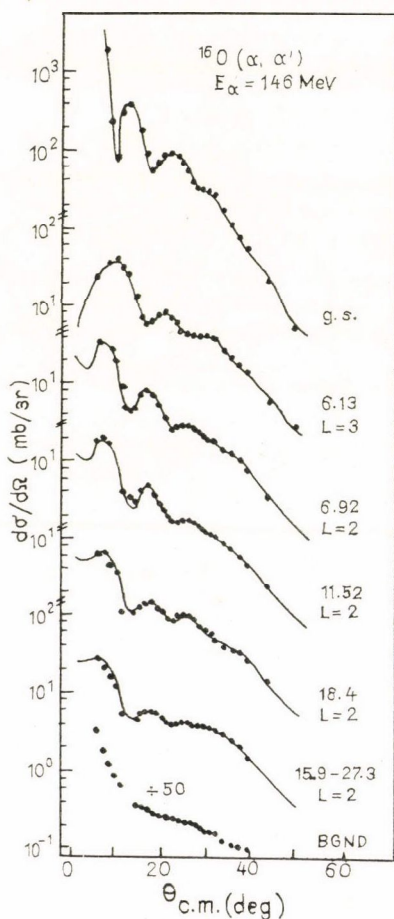
Al és Mg esetében, a  $63 \cdot A^{-1/3}$  törvényből becsült GQR energia nagyobb ( $\approx 25$  MeV), mint a kísérletileg meghatározott energiaközép.

A szaggatott vonal feletti széles csúcs, valamint a 18,4 MeV és a többi domináns  $\alpha$ -csoport szögeloszlását meghatároztuk. Az eredményt a 16. ábra együtt mutatja a DWBA illesztésekkel (komplex csatolás) [22]. Látható, hogy az erős 18,4 MeV csoport szögeloszlása nagyon hasonló a 15,9 és 27,3 MeV közötti teljes GR szerkezetéhez. Mindkét eloszlást jól illeszti a megfelelő  $L=2$  DWBA görbe. Az ismert alacsonyabb gerjesztési energiájú kollektív állapotoknak megfelelő szögeloszlásokat is jól lehetett írni.

Mindebből arra következtettünk, hogy más multipolaritásoktól ( $E0$  és  $E4$ ) származó kicsiny járulékoktól eltekintve, a széles csúcs 15,5 MeV és 27,3 MeV között  $T=0$  GQR-nak felel meg. A csúcs az összszabály adta határnak  $67 \pm 25\%$ -át



15. ábra



16. ábra



hordozza (valós csatolás). A másik két  $L=2$  állapot 6,9 és 12 MeV között egyenként kb. 11% erősséget hordoz.

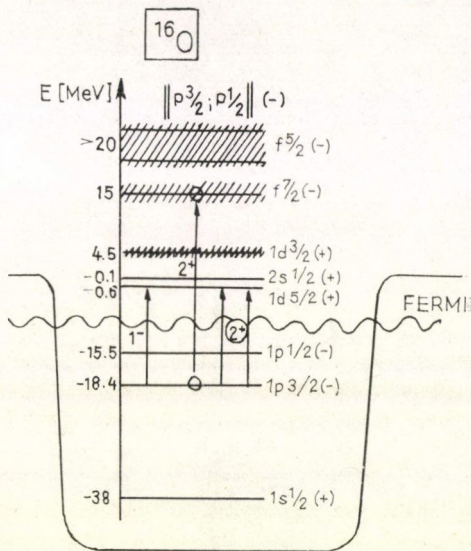
Egy egyszerű héjmodellben (17. ábra) az  $^{16}\text{O}$  óriás kvadrupól rezonanciáját ( $2\hbar\omega$ ) lényegében a  $2p$  és  $1f$  részecskék  $1p^{-1}$  lyukakkal való különböző kombinációi építik fel. A magasan gerjesztett állapotok közül csupán az  $f_{7/2}$  rezonancia keskeny (szélessége  $\cong 1$  MeV); az  $f_{5/2}$  szélesség már 10 MeV körül van és a  $2p$  állapotok erőssége közel folytonosan oszlik el magasabb energiákon. Ezért érthető, hogy a kísérletben talált viszonylag keskeny GQR szerkezet elsősorban  $1f_{7/2} - 1p_{3/2}$  természetű [23]. Az  $(\alpha, \alpha')$  kísérletben a „széles” konfigurációk is gerjesztődnek, de ezek nem láthatók a spektrumokban, mivel erősségük egyenletesen osztódik el és beleolvadnak a folytonos háttérbe.

Az  $1p$  RPA segítségével csak a GQR teljes erőssége és energia közepe írható le közelítőleg, de a kapott szélesség már túlságosan kicsiny és a finomszerkezet hiányzik. Ezek az utóbbi tulajdonságok csak akkor kaphatók meg, ha bonyolultabb konfigurációkat, pl.  $2p\ 2h$  komponenseket is figyelembe veszünk a nagy szélesség értelmezése érdekében.

Ilyen számításokat az  $^{16}\text{O}$ -ra ismét a törzs-csatolásos közelítésben hajtottak végre [21]. A számítások kiadják az  $E2$   $T=0$  erőkoncentrációt a kísérletileg talált 16–28 MeV GQR tartományban. Az erősség összegszabály adta határának 83%-a ebben a tartományban adódott, ami jól egyezik a kísérletileg kapott  $67 \pm 25\%$  eredménnyünkkel.

Nincs egyezés azonban az erre a tartományra (20–28 MeV) vonatkozó  $^{15}\text{N}(p, \gamma)^{16}\text{O}$  befogási kísérletekből kapott sokkal kisebb  $E2$  erősséggértékekkel [24]. Sőt, ez az  $E2$  erősség többé-kevésbé egyenletesen oszlik el, azaz rezonancia szerkezet nélkül. Ezenkívül figyelembe kell még azt is venni, hogy az erősség  $T=0$  jellegű. Ezeket a tulajdonságokat kvalitatív módon meg lehet magyarázni [23] akkor, ha arra gondolunk, hogy az  $^{15}\text{N}$  alapállapota lényegében  $1p_{1/2}^{-1}$ . Következésképpen ezekben a befogásos kísérletekben főleg az  $1f_{5/2} 1p_{1/2}^{-1}$  és a  $2p_{3/2} 1p_{1/2}^{-1}$  konfigurációk gerjednek. Azonban, mint ahogy azt korábban említettük, mind a két részecske-állapotnak különlegesen nagy szélessége van és ezért nem tételezhető fel [21], hogy lényeges járulékot adnak az  $(\alpha, \alpha')$  spektrumokban jelentkező erőteljes GQR csúchoz, melyben a „keskeny” ( $1f_{7/2} 1p_{3/2}^{-1}$ ) állapot dominál. Az  $(\alpha, \alpha')$  kísérletben a „széles” konfigurációk is gerjednek, de ezek nem értékelhetők ki a spektrumból, mivel erősségük egyenletesen oszlik el, és így eltűnik a folytonos  $\alpha$  háttérben.

Egy másik megközelítésben [25], a szeparálható kölcsönhatási modellben (Model of Separable Interaction — MSI) a  $2\hbar\omega$  gerjesztési energia összes  $1p\ 1h$  és  $2p\ 2h$  konfigurációit figyelembe vették. Így a  $2p\ 2h$  konfigurációk esetében számoltak a Fermi felület feletti és egygyel alatti főhéjjal kapcsolatos gerjesztésekkel.



17. ábra



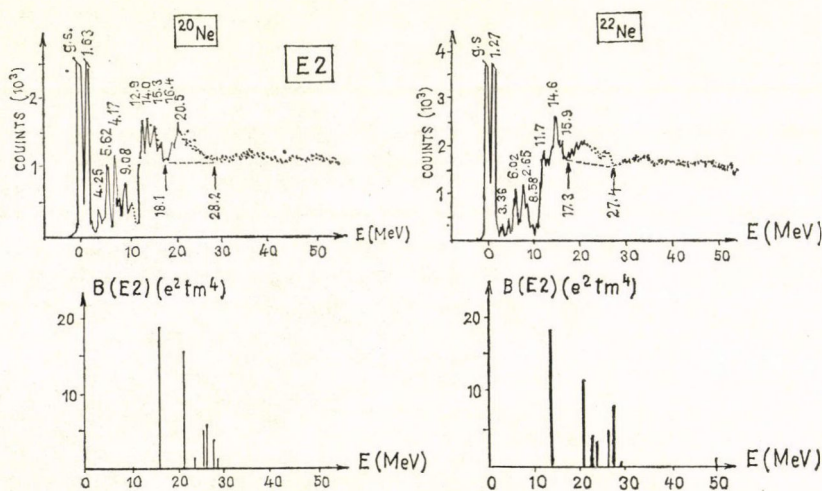
Itt újra azt találták, hogy a  $2p\ 2h$  gerjesztések erősen felhasították az  $1p\ 1h$  óriász-rezonancia állapotokat, és olyan  $E2\ T=0$  erősséglegsláshoz vezettek, melyek meglehetősen jó egyezésben vannak az  $(\alpha, \alpha')$  kísérlettel [22]. Az erősség a számításokból a 20–40 MeV tartományban az EWSR határ 40%-a körülnek adódott.

## 2.5. Az $^{16}\text{O}$ körüli magok

Az  $^{16}\text{O}$  óriász kvadrupól rezonanciájára kapott eredmények alapján érdemes megvizsgálni a szomszédos magokat, hogy lássuk milyen hatása van annak, ha egy nukleont hozzáadunk, illetve elveszünk az  $^{16}\text{O}$  törzsből. Ennek a problémának a szisztematikus tanulmányozását a jülichi Izokronus Ciklotronon, a JULIC-en 155 MeV energiájú alfa részecskék rugalmatlan szórásával végeztük el [26, 27]. A  $^{12}\text{C}$ -től a  $^{28}\text{Si}$ -ig terjedő tartományban eddig 12 magot vizsgáltunk.

A 18. ábra a példa kedvéért bemutatja a  $^{20}\text{Ne}$  és  $^{22}\text{Ne}$  esetén felvett  $(\alpha, \alpha')$  spektrumokat [26] és összehasonlítja az elméleti MSI számításokkal [28]. 20 MeV körül a GR hozam koncentrációi láthatók a spektrumokban (szaggatott vonal felett). Ezeknek a széles csúcsoknak a szögeloszlásait jól lehet illeszteni  $L=2$  típusú DWBA görbékkel, ami  $L=2$  jellegük domináns voltát bizonyítja. A csúcsok az összegszabály adta határt  $(35 \pm 25)\%$  és  $(32 \pm 25)\%$  körül merítik ki (valós csatolás) a  $^{20}\text{Ne}$ , illetve a  $^{22}\text{Ne}$  esetében. Ez az erősség kb. egy kettes faktossal kisebb, mint  $^{16}\text{O}$ -ban. A csökkenés oka az, hogy az E2 erősség alacsonyabban fekvő állapotokhoz tolódik, pl. a  $^{20}\text{Ne}$  esetében 12 és 18 MeV között levőkéhez, melyek az izoskalár E2 összegszabály-erősség 19%-át hordozzák.

A GQR erősségnek ez a magas és alacsony energiájú komponensre való felhasználását az erlangeni csoport [28] egy mostanában elvégzett MSI számításában reprodukálta (18. ábra alsó része). Ezen túlmenően a két tartományban az E2 erősségre vonatkozó számítási eredmények is jó egyezésben vannak a kísérlettel. Ebben a mo-



18. ábra



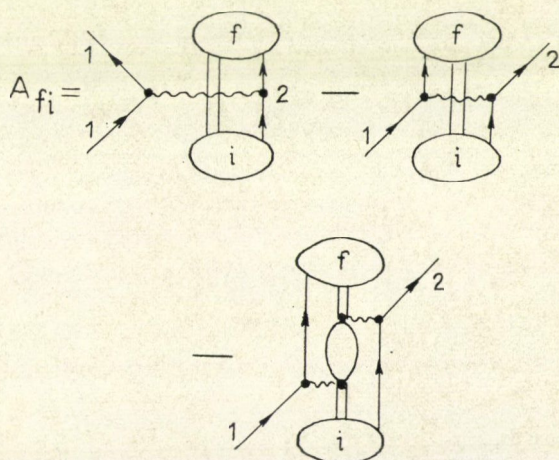
dellben az  $^{16}\text{O}$ -törzs GR gerjesztése csatolódik az  $^{16}\text{O}$  törzsön kívüli valencia nukleonok gerjesztéséhez. A GQR-t elsősorban az  $1p\ 1h\ (2\ \hbar\omega)$  konfigurációs térben írják le, míg a valencia nukleonok gerjesztéseit az sd-héjra korlátozzák. A valencia nukleonok és a törzs közötti kölcsönhatás paramétereit úgy választották meg, hogy azok visszaadják a GQR kísérletileg megfigyelt energiaközepét.

### 3. Az óriászrezonanciák vizsgálata a gerjesztési függvény módszerrel

A rugalmatlan szórás folyamatban való óriászrezonancia gerjesztés egy másik típusa [29] szempontjából is fontosak az olyan törzs gerjesztésére vonatkozó megfontolások, melyek a valencia részecske gerjesztéssel kapcsolatosak. Ez a mechanizmus egy olyan speciális kétlépéses folyamatot tartalmaz, melyben a GR mint közbeeső állapot gerjesztődik. Illusztrálásként annak a munkának az eredményét szeretném diszkutálni, melyben a  $^{24}\text{Mg}$  nem természetes paritású  $3^+$  5, 23 MeV állapotán való proton rugalmatlan szórását tanulmányoztuk [30].

Egyszerű közelítésben az átmeneti amplitúdót (19. ábra) a következő folyamatok adják meg: (1) két járulék adódik abból a direkt gerjesztésből, mely a valencia nukleonokat az  $i$  alapállapotból az  $f$  végállapotba gerjeszti és (2) fontos a rezonancia kicserélődési tag, mely az óriászrezonancia gerjesztéséről ad számot. Ebben az utóbbi folyamatban az első lépésben a bejövő proton a törzsben gerjeszti az óriászrezonanciát. Ily módon a bejövő részecske energiája nagy részét elveszti és ezért befogódik egy gerjesztett, de kötött részecske végállapotba ( $f$ ). Világos, hogy ez a folyamat csak úgy mehet végbe, ha az óriászrezonancia-energia és a befogott proton rögzített szeparációs energiája kiadja a bejövő energiát. Így a GR-rel kapcsolatos rezonancia jelenséggel állunk szemben.

A második lépésben az óriászrezonancia a kezdeti állapot valencia protonjával való kölcsönhatással bomlik. Lyuk keletkezik és a kimenő 2. számú proton elhagyja a rendszert. A végmag  $1p\ 1h$  komponensekből álló  $3^+$  állapotban marad. Mindent



19. ábra

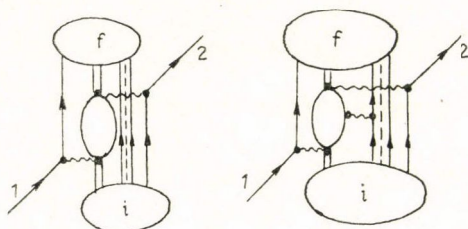


összevéve, egy olyan erre a kötött állapotra vezető rugalmatlan szórási folyamat ment végbe, melynek során a GR virtuális gerjesztése történt.

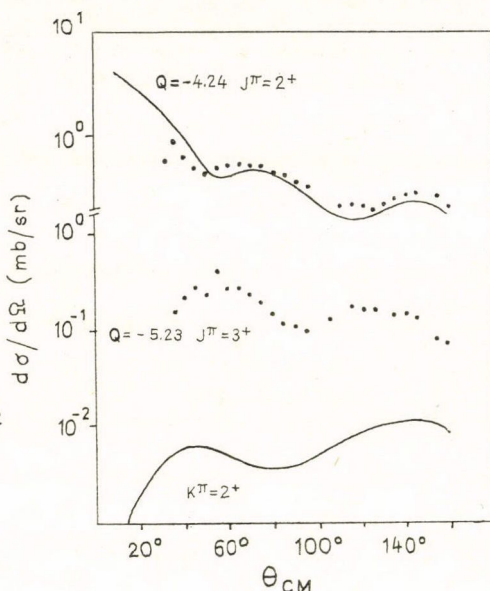
Tegyük fel, hogy az  $^{16}\text{O}$ -ban törzsgerjesztés ment végbe. Ezért első közelítésben inkább a 20. ábra bal oldalán látható helyzettel van dolgunk, míg egy realisztikusabb tárgyalásmódban a jobb oldali, az  $^{16}\text{O}$  törzs és a  $^{24}\text{Mg}$  valencia nukleonjai közötti kölcsönhatást figyelembe vevő kép érvényes.

Az óriásrezonancia hatása elsősorban olyan esetekben jelentkezik, amikor a rendszer egylépéses kollektív rugalmatlan folyamat nem gerjeszti a vizsgált kötött állapotot és a csatorna csatolásos (cc) mechanizmusokból származó járulékok kicsik. Erről az esetről van szó a nem természetes spinparitású állapotoknál, pl. a  $^{24}\text{Mg}$   $3^+$  állapotánál.

Kísérletileg az ilyen állapotra vezető rugalmatlan szórási hatáskeresztmetszet szögeloszlását kell meghatározni. Abban az esetben, ha a bombázó energia éppen akkora, hogy a GR gerjesztődhet, akkor az a szögeloszlás alakját erősen befolyásolhatja.



20. ábra



21. ábra

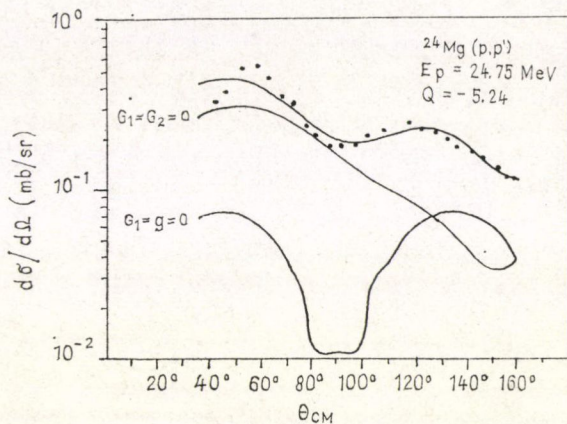
Ilyen kísérlet eredményét mutatjuk a 21. ábrán  $E_p = 25,75$  MeV-nél. Miközben a CC illesztés a normális paritású  $2^+$  állapothoz tartozó szögeloszlásra még elegendően jó, addig a  $3^+$ -os szögeloszlásra vonatkozó illesztés mind alakilag, mind nagyságrendileg teljesen rossz. Ezzel szemben a törzs-gerjesztési modell a szögeloszlást elég jól illeszti (mikroszkopikus DW analízis), ahogy azt a 22. ábrán láthatjuk is. A  $G_1 = G_2 = 0$  görbe az egylépéses járulékokat adja vissza. A  $G_1 = g = 0$  görbe a kvadrupól részről ad számot. A dipól járulékkal együtt az előbbi kettő a legfelső görbét adja, mely illeszti az adatokat. Az ilyen törzs gerjesztési modell (core excitation model — CEM fit) illesztésből a gerjesztésre vonatkozó erősség paraméter, azaz pl. a GQR erősség paramétere meghatározható.

Figyelembe véve, hogy az óriásrezonanciák több MeV szélesek, a szögeloszlásokat a bemenő energia több, egymásra kis lépésekben következő értékeinél kell megmérni, amiből az erősségeloszlás meghatározható. Ez más módon azt jelenti,

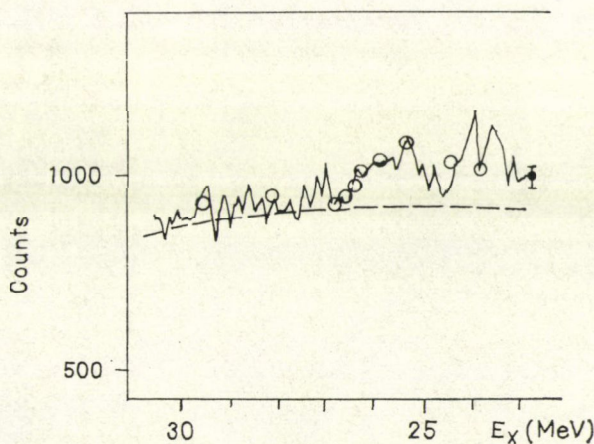


hogy egy gerjesztési függvény módszert alkalmazunk az erősségfüggvény meghatározására.

A 23. ábra összehasonlítja azokat az eredményeket, melyeket az előbbi gerjesztési függvény módszerrel (körök), illetve spektrum módszerrel kaptunk (kihúzott vonal). A szaggatott vonal a háttérrel jelenti, melyre az  $\alpha'$  spektrumban az E2



22. ábra



23. ábra

rezonancia ráül. Megfelelő normalizáció felhasználásával ehhez a vonalhoz, mint referenciához viszonyítva, ábrázoltuk azokat az E2 erősség értékeket, melyeket a CEM analízisből kaptunk. Az eredmény elméletileg elsőrendűen fontos. Másrésztől azonban meg kell említenünk, hogy a GR-ben levő durva- és finomszerkezet miatt a gerjesztési függvény módszer alkalmazása nem nagyon hasznos, mivel gyakorlati okok miatt csupán néhány különböző bemenő energiához tartozó pont

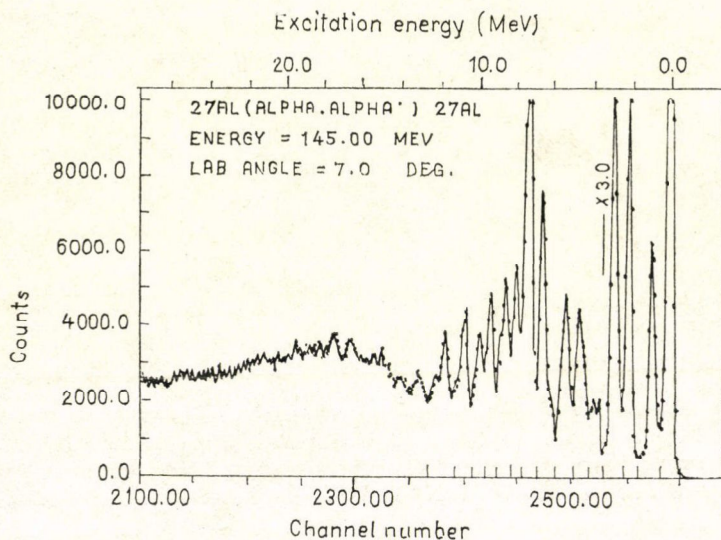


mérhető. Ezek aztán persze nem mutatják a GR minden részletét. Mindazonáltal a CEM típusú analízissel jobban eloszlott olyan erősségek is meghatározhatók, melyek a spektrumokban nem emelkednek ki, és így a spektrummódszerrel vizsgálatuk nem lehetséges.

#### 4. E3 óriásrezonancia az $^{27}\text{Al}$ -ben

Előadásom végén röviden még két új, a JULIC-en kapott eredményt szeretnék megemlíteni.

Az első egy új típusú óriás rezonanciára vonatkozik, melyet az  $^{27}\text{Al}$ -ben találtunk [32]. A 24. ábra egy, 145 MeV energián felvett ( $\alpha, \alpha'$ ) spektrumot mutat 28 MeV gerjesztési energiáig. A spektrum bal oldali részét, 4 MeV gerjesztési energia alatt egy 3-as faktossal átskáláztuk. Az óriás kvadrupól rezonancia itt, ebben a kinyújtott spektrumban, mint 18 MeV körüli széles csúcs jelentkezik. A GQR és az alapállapotú sáv alacsonyban fekvő ismert kollektív állapotai között 4–14 MeV-nél a nívók egy kompakt 4 MeV félértékszélességű csoportja látszik. Nyilvánvaló, hogy ez a csoport az ( $\alpha, \alpha'$ ) folyamatban szelektív módon populálódik.

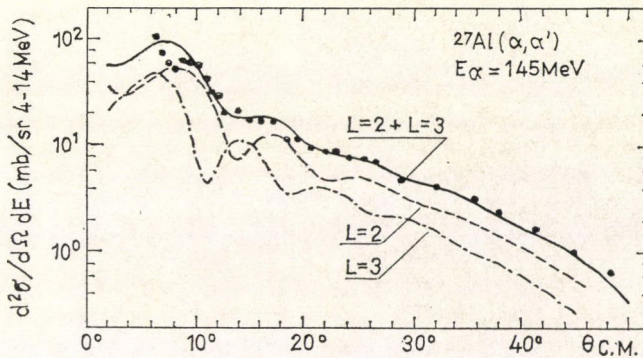


24. ábra

A nívócsoport csúcshoz tartozó tartományaira az abszcisszán jelölt energiatartományokkal meghatároztuk a szögeloszlásokat. Ezek alakja mind hasonlóan adódott. Az olyan fő csoportok szögeloszlásai, melyek kísérleti hibái viszonylag kicsik, jól illeszthetők az  $L=3$ , illetve  $L=2$  DWBA görbék szuperpozíciójával, ha a DWBA hatáskeresztmetszetek 2:1 arányban keveredtek.

Ezen túlmenően a 25. ábrán bemutatott, az egész kompakt nívócsoportra vonatkozó hozam szögeloszlása hasonló módszerrel illeszthető. Az E3, illetve az E2 izoskalár EWSR kimerítésére 15% és 14% felső határ adódott.





25. ábra

Egy nagyobb felbontású kísérletben megmutattuk [32], hogy a kompakt nívócsoportban több csúcs kettős szerkezetet mutat, ami a két DWBA görbe inkoherens szuperpozíciója módszerének helyességét támasztja alá.

A héj-modellnek megfelelően ez az oktapól erősség koncentráció  $1\hbar\omega$  típusú E3 ( $T=0$ ) óriászrezonancia lehet olyan  $ph$  komponensekkel, melyeknél a  $2p$  és  $1f$  részecskék csatolódnak a  $d_{5/2}^{-1}$  lyukhoz. Különösen a „keskeny”  $(1f_{7/2} \otimes 1d_{5/2}^{-1})_3$  komponensről várható, hogy felelős az  $(\alpha, \alpha')$  spektrumban jelentkező viszonylag keskeny  $L=3$  szerkezetért. Hasonló  $1\hbar\omega$  E3  $T=0$  típusú erősségkoncentráció felléptét jósolták a  $^{12}\text{C}$  és  $^{16}\text{O}$  magok esetében [21] a 15–18, illetve 12–16 MeV energia tartományban. Az  $^{27}\text{Al}$ -nál feltételezhető, hogy a  $d_{5/2}^{-1}$  alapállapotú proton lyuk gyengén csatolódik az  $1\hbar\omega$  E3 típusú gerjesztéshez és ily módon jelentősen hozzájárul a kompakt nívócsoport kiszélesedéséhez.

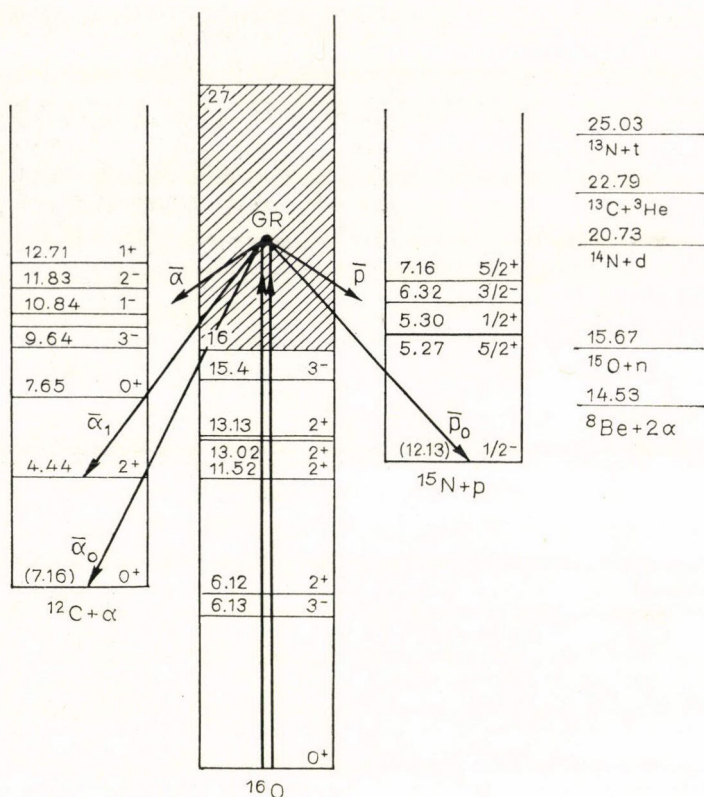
A kísérletileg adódó 8,5 MeV energia-közép valamivel alacsonyabb, mint a több középhez mag alacsony energiájú oktapól rezonanciájára újabban meghatározott  $32 \cdot A^{-1/3}$  (MeV) összefüggésből [33] számítható érték. Ez a különbség azonban nem váratlan, ha a GQR nagyon könnyű magokban mutatott viselkedésére [18] gondolunk, ahol az energiaközép szintén jelentősen kisebb, mint a hidrodinamikai  $63 \cdot A^{-1/3}$  MeV érték.

## 5. A GQR részecskebomlása $^{16}\text{O}$ -ban

Az utolsó pont az  $^{16}\text{O}$  óriászrezonanciájának részecskebomlásával foglalkozik [34, 35]. Az  $^{16}\text{O}$ , valamint a  $\bar{p}$ ,  $\bar{\alpha}$  és  $2\alpha$  bomlás szempontjából fontos magok nívósémáját a 26. ábra mutatja.

A heidelberg–jülichi csoport a JULIC-en végrehajtott kísérletében az  $^{16}\text{O}(\alpha, \alpha', \bar{c})$  típusú folyamatokat vizsgálta  $E_\alpha = 155$  MeV esetén. Itt  $\bar{c}$  a töltött bomlási részecskét jelöli, tehát lehet pl. proton ( $\bar{p}$ ),  $\alpha$  részecske ( $\bar{\alpha}$ ), vagy más töltött termék ( $\bar{x}$ ). A szóban forgó kísérletben, koincidencia spektrumokat mértek úgy, hogy az első koincidencia csatornában a rugalmatlanul szórt alfa részecskéket detektálták, a másokban a  $\bar{c}$  töltött részecskéket, azaz  $(\alpha', \bar{c})$ ,  $(\alpha', \bar{p})$ ,  $(\alpha', \bar{\alpha})$  és  $(\alpha', \bar{x})$  típusú koincidencia spektrumokat határoztak meg.



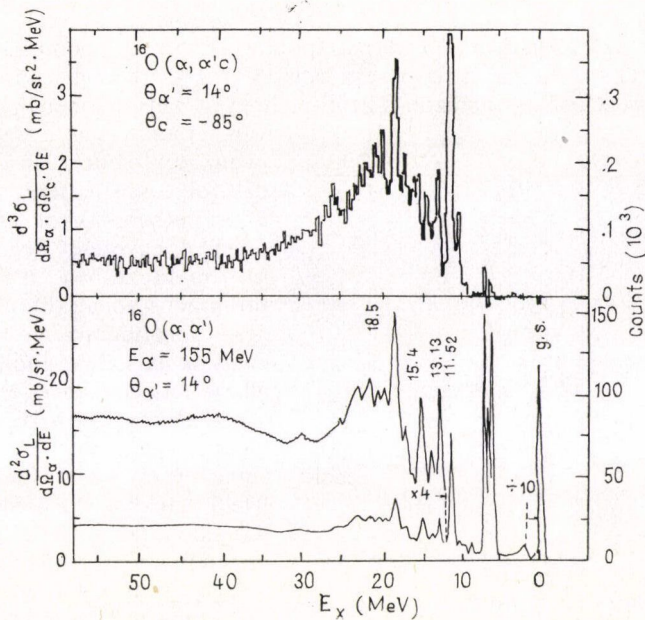


26. ábra

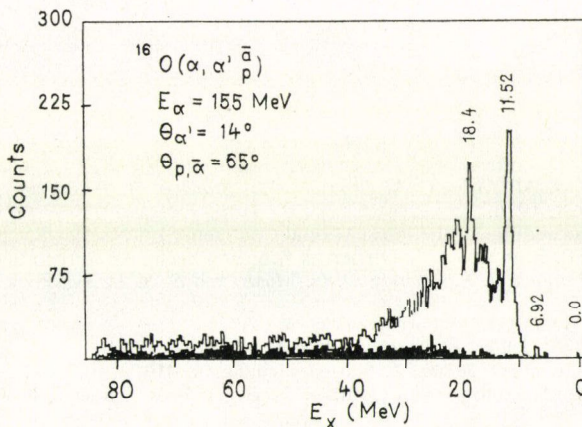
A 27. ábra alsó fele összehasonlítóképpen mutatja az  $^{16}\text{O}$  óriás kvadrupól rezonanciáját egy  $(\alpha, \alpha')$  spektrum segítségével, melyet  $14^\circ$ -ban, vagyis az  $L=2$  szögeloszlás egyik maximumában vettek fel. A felső rész azoknak az  $\alpha'$  részecskének a spektrumát mutatja be, melyek koincidenzában voltak valamely  $-65^\circ$ -ban kibocsátott  $\bar{c}$  töltött részecskével. Világosan látszik, hogy a folytonos háttér erősen lecsökkent. Ez arra utal, hogy más olyan reakciók, melyeknél egy  $\alpha'$ , és még legalább egy töltött részecske emittálódik kis gyakoriságúak, és a legtöbb  $\bar{c}$  töltött részecske a GR csúcsból bomlik el.

A 28. ábra két,  $(\alpha', \bar{\alpha})$  és  $(\alpha', \bar{p})$  típusú koincidenzá spektrumot mutat be; az utóbbit mutatja a besötétített terület. Nyilvánvaló, hogy a fő eredmény annak megállapítása, hogy a GQR lényegében  $\bar{\alpha}$  emisszióval bomlik. A koincidenzá protonok erőssége nagyon kicsi és nem is koncentrálódik a GR tartományban. Erősségük közel egyenletesen oszlik el egy nagy  $\alpha'$ -energia tartományban. Ez a megfigyelés, hogy ti. a  $\bar{p}$  bomlási csatorna erősen elnyomódik az  $\alpha'$  bomlással szemben, egyezésben látszik lenni a  $^{14}\text{N}(\bar{p}, \gamma_0)^{16}\text{O}$  befogási eredményekkel [24], melyek csak kicsiny E2 erősséget mutattak. Ez igaz a  $^{15}\text{N}$  alapállapotába történő bomlásnál.





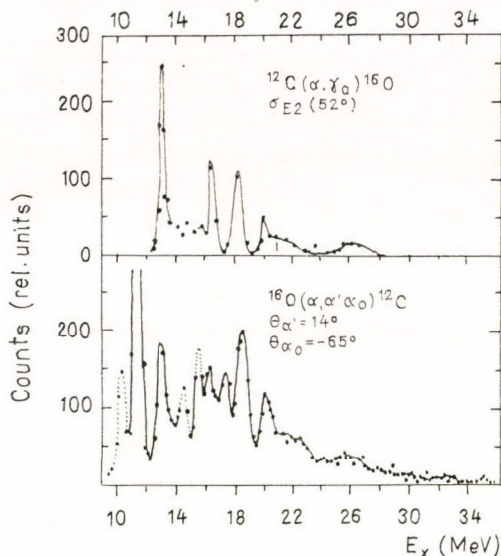
27. ábra



28. ábra

Azt, hogy a befogási kísérlet (egyezésben a  $\bar{p}$  bomlási eredményekkel) miért nem mutat egy rezonanciaszerű E2 erősség koncentrációt, előadásomban már korábban megmagyaráztam az  $f_{5/2}$  és a  $2p$  egy-részecske nívók nagyon nagy szélességével. A  $(p_{3/2}^-)$  első gerjesztett állapotba való  $\bar{p}$  bomlás feltehetően erősen elnyomódik a kis áthaladási valószínűség miatt. Másrészről viszont az  $\bar{\alpha}$  bomlás nagy valószínűségű lehet a viszonylag nagy penetrabilitás miatt.

A 29. ábra alsó része az  $\bar{\alpha}_0$  csoporttal koincidenciában levő  $\alpha'$  spektrumot mutat be, azaz az  $^{16}\text{O}$ -nak a  $^{12}\text{C}$  alapállapotára vezető  $\bar{\alpha}_0$  bomlásának erősségeloszlását. Összehasonlításként a felső rész egy  $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma_0)^{16}\text{O}$  befogási kísérletben [36], kapott E2 erősségeloszlást ábrázol. Látható, hogy a két eredmény jó egyezésben



29. ábra

van, amennyiben a szerkezetre vagyunk tekintettel. Ha még a maradék folytonos háttérrel is levonjuk az  $\bar{\alpha}$ -kísérletben, akkor az erősségeloszlások egyezése még jobb. Ebben a vonatkozásban a 18,4 MeV-es prominens vonal különlegesen érdekes: az általunk mért  $\Gamma_{\alpha_0}/\Gamma$  parciális vonalszélességből, és ennek az állapotnak az ismert B(E2) értékéből [22] meghatároztuk a  $\Gamma_{\alpha}\Gamma_{\gamma}/\Gamma$  mennyiséget, mely jó egyezésben van a  $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma_0)$ -ból [36] adódó megfelelő értékkel. Az eredmény sikeresen ellenőrzi azoknak az izoskalár átmeneti erősségeknek a megbízhatóságát, melyeket a szokásos DWBA számításokkal határoztak meg a nagy frekvenciájú oszcillációkra. Ez alátámasztja a DWBA analízis segítségével az  $^{16}\text{O}$  óriás kvadrupól rezonanciája [22] esetén nyert abszolút összesszabály értékek helyességét.

## IRODALOM

1. D. H. Youngblood, J. M. Moss, C. M. Rozsa, J. D. Bronson, A. D. Bacher, and D. R. Brown, Phys. Rev. C 13, 994, 1976.
2. S. S. Hanna, in Proceedings of the International Conference on Nuclear Structure, Amsterdam, 1974, edited by H. P. Blok and A. E. Dieperink Scholar's Press, Amsterdam 1974, Vol. 2, p. 249.
3. E. Kuhlmann, E. Ventura, J. R. Calarco, D. G. Mavis, and S. S. Hanna, Phys. Rev. C 11, 1525, 1975.
4. G. C. Baldwin and G. S. Klaiber, Phys. Rev. 71, 3, 1947.
5. M. Goldhaber, and E. Teller, Phys. Rev. 74, 1046, 1948.
6. H. Steinwedel, and J. H. D. Jensen, Z. Naturforschung 5a, 413, 1950.
7. H. Überall: Electron Scattering from Complex Nuclei, Part B Academic Press, New York and London, 1971. pp. 664-5.
8. D. H. Wilkinson, Annual Review of Nuclear Science 9, 1, 1959.
9. G. E. Brown, and M. Bolsterli, Phys. Rev. Lett. 3, 472, 1959.
10. A. Bohr, and B. R. Mottelson, Nucl. Structure II. Benjamin New York. 1976. p. 509.
11. T. Walcher, Proceedings of the International Conference on Nuclear Physics, Munich, Aug. 27—Sept. 1, 1973, Vol. 2, page 510; edited by J. de Boer and H. J. Mang, 1973, North-Holland Publishing Company — Amsterdam, London.
12. G. R. Satchler, Phys. Reports 14, 97, 1974.
13. G. R. Satchler, Nucl. Phys. A195, 1, 1972.
14. A. Djalois, A. Kiss, C. Mayer-Böricke, M. Rogge, P. Turek, S. Wiktor: Annual Report 1975 of the Institute for Nuclear Physics of KFA Jülich, Germany KFA-IKP 10/76, page 10 and to be published.



15. F. E. Bartrand, *Ann. Rev. Nucl. Sci.* 26, 457, 1976.
16. J. M. Moss, C. M. Rozsa, D. H. Youngblood, J. B. Bronson, and A. D. Bacher, *Phys. Rev. Lett.* 34, 748, 1975.
17. S. S. Hanna, *Proceedings of the International School of Electro and Photonuclear Reactions and Applications*, Erice Trapani, Sicily, 2—17 June 1976.
18. A. Kiss, C. Mayer-Böricke, M. Rogge, P. Turek, and S. Wiktor, *Phys. Rev. Lett.* 37, 1188, 1976.
19. N. Marty, *Institut de Physique Nucléaire, Orsay*, private communication.
20. P. Turek, A. Kiss, C. Mayer-Böricke, M. Rogge, and S. Wiktor, *Annual Report 1976 of the Institute for Nuclear Physics of KFA Jülich, Germany, KFA-IKP 10/77*, p. 4; *Verhandl. DPG (VI)* 12 1008, 1977, and to be published.
21. J. S. Dehesa, S. Krewald, J. Speth and A. Faessler, *Phys. Rev. C* 15, 1858, 1977.
22. K. T. Knöpfle, G. J. Wagner, H. Breuer, M. Rogge, and C. Mayer-Böricke, *Phys. Rev. Lett.* 35, 779, 1975.
23. J. Speth: *Proceedings of the XV International Winter Meeting on Nuclear Physics*, Bormio (Italy) 1977.
24. S. S. Hanna, H. F. Glavish, R. Avida, J. R. Calarco, E. Kuhlmann, and R. LaCanna, *Phys. Rev. Lett.* 32, 114, 1974.
25. W. Knüpfer, and M. G. Huber, *Z. Phys.* A276, 99, 1976.
26. K. T. Knöpfle, G. J. Wagner, A. Kiss, M. Rogge, C. Mayer-Böricke, and Th. Bauer, *Phys. Lett.* 64 B, 263, 1976.
27. K. T. Knöpfle, C. Mayer-Böricke, W. Oelert, H. Riedesel, M. Rogge, and G. J. Wagner, *Annual Report 1976 of the Institut für Kernphysik der KFA Jülich, Jülich, Germany KFA-IKP 10/77*, p. 5 and to be published.
28. W. Knüpfer, K. Knaus, and M. G. Huber, *Phys. Lett.* 66 B, 305, 1977.
29. H. V. v. Geramb, K. Amos, R. Sprickmann, K. T. Knöpfle, M. Rogge, D. Ingham and C. Mayer-Böricke, *Phys. Rev. C* 12, 1967, 1975.
30. I. Lovas, M. Rogge, U. Schwinn, P. Turek, D. Ingham and C. Mayer-Böricke, *Nucl. Phys.* 1977, in press.
31. C. Mayer-Böricke, A. Kiss, M. Rogge, S. Wiktor and P. Turek, *Annual Report 1976 of the Institute for Nuclear Physics of KFA Jülich, Germany, KFA-IKP 10/77*, page 9.
32. C. Mayer-Böricke, W. Oelert, A. Kiss, M. Rogge, A. Turek, and S. Wiktor, *Annual Report 1976 of the Institute for Nuclear Physics of KFA Jülich, Germany KFA-IKP 10/77*, page 10, and submitted for publication in *Nucl. Phys.* 1977.
33. J. M. Moss, D. H. Youngblood, C. M. Rozsa, D. R. Brown, and J. B. Bronson, *Phys. Rev. Lett.* 37, 816, 1976.
34. T. Bauer, H. Breuer, A. Kiss, K. T. Knöpfle, C. Mayer-Böricke, P. Paul, M. Rogge, and G. J. Wagner, *Annual Report 1975 of the Institute for Nuclear Physics of KFA Jülich, Germany, KFA-IKP 10/76*, page 19.
35. H. Breuer, K. T. Knöpfle, C. Mayer-Böricke, P. Paul, M. Rogge, P. Turek and G. J. Wagner, *Annual Report of the Institute for Nuclear Physics of KFA Jülich, Germany, KFA-IKP 10/77*, page 14 and contributed paper to the Tokyo Conference, September 1977.
36. K. A. Snover, E. G. Adelberger, and D. R. Brown, *Phys. Rev. Lett.* 32, 1061, 1974.

Fordította: Kiss Ádám





# KÖNYVISMERTETÉS

A. Nishida: *Geomagnetic Diagnosis of the Magnetosphere*  
Physics and Chemistry in Space 9.  
Springer-Verlag, New York, Heidelberg, Berlin

A sikeres sorozat jelen kötete — a földmágneses tér jellegzetes variációit vezérfonalként választva — a Föld magnetoszférájának fizikáját foglalja össze. A könyv előszava hangsúlyozza azt a tényt, hogy a magnetoszféra folyamataira nézve a Föld felszínén észlelhető mágneses tér jelentős információt hordoz. A magnetoszféra, a napszél és a befogási zóna létezésére — még a mesterséges égitestek alkalmazása előtt — a geomágneses adatok analízise alapján következtettek.

A könyv — célkitűzésével összhangban — teret szentel azoknak a (klasszikus értelemben véve már) ionoszféra-fizikai vonatkozásoknak is, amelyek mellőzésével a földmágneses tér változásainak tárgyalása nem lehetne teljes.

Az *első fejezet* a gyors impulzusok áttekintésével kezdődik, idézve a történelmi pillanatot, amikor Chapman és Ferraro 1931-ben — a mágneses viharok kezdetén gyakran fellépő SSC (Storm Sudden Commencement) impulzus értelmezéseként — a magnetoszféra létezését megsejtette. E fejezet összefoglalja a — napszél és a Föld mágneses terének kölcsönhatásaként kialakuló — magnetoszféra alakjára vonatkozó elméleti megfontolások lényegét. Az interplanetáris laboratóriumok mérési adatainak tükrében rámutat jelenlegi ismereteink korlátaira. Vázolja a magnetoszféra alak- és térfogatváltozásait összefüggésben fellépő gyors impulzusok (SI) problematikáját.

A *második fejezet* azt a — sokak által elfogadott, de egyesek által vitatott — elgondolást mutatja be, hogy miként szabályozza az interplanetáris mágneses tér iránya a napszélből a magnetoszférába bejutó energiát. Emellett nagy teret szentel a DP2 fluktuációk tárgyalásának, amelyek az interplanetáris és a földmágneses erővonalak összekapcsolódásának közvetlen következményeként értelmezhetők.

A *harmadik fejezet* a geomágneses uszály instabilitási jelenségével, illetve ennek következményével — az Akasofu által felismert szubviharokkal — foglalkozik. Az instabilitás következtében a napszél által a geomágneses uszályba betáplált energia az éjszakai oldalon lökésszerűen a Föld felé áramlik. Az áramlása közben adiabatikusan gyorsított plazma-részecskéknek ez a lökésszerűen megerősödő konvekciója — többek között — a sarki mágneses szubviharokban és a sarkifény szubviharokban tükröződik.

A sarki mágneses szubvihar az aurora ovál mentén az ionoszférában kialakult elektrojet megerősödésének következménye. Az elektrojet a mágneses erővonalak mentén a magnetoszférából és az ionoszférába vetülő elektromos terekből táplálkozik. (A mágneses erővonal menti elektromos terek és áramok meglehetősen tisztázatlan kérdését e fejezetben belül külön szakasz tárgyalja.)

A könyv *negyedik fejezete* a belső magnetoszféra dinamikájára vonatkozó korszerű ismereteket foglalja össze. A geomágneses viharok főfázisát a gyűrűáram kelti. Ez a szubviharok folyamán a Föld felé nyomuló — termikusnál nagyobb energiájú — plazma protonjainak drift-mozgása következtében alakul ki a befogási zónában. A magnetoszféra nagy plazmasűrűségű (és főleg termikus plazmát magába foglaló) zónáját határoló felület — a plazmapauza — helyzete ugyanúgy a napszél-viszonyok és az interplanetáris mágneses tér irányának függvénye, mint például a mágneses viharok fellépése.

Az *ötödik fejezet* a magnetoszféra rezonátor jellegét tárgyalja. Az elektromágneses behatások viszonylag széles frekvencia skálájában a magnetoszféra hidromágneses közegként viselkedik. A magnetogramokon megfigyelhető különféle pulzációk a hidromágneses hullámterjedés következtében lépnek fel. Létrejöttük bizonyos plazmainstabilitásokkal függ össze. (Például: Kelvin—Helmholtz-instabilitás, ciklotron instabilitás.) A hullámok terjedését a Föld felé az ionoszféra és a semleges légkör módosítja.

A mű egyik (és talán hézagpótló) érdeme, hogy tömörsége ellenére a jelenségeket morfológiai oldalról is jól körvonalazza, célrátörően megválasztott ábra-anyaggal szemlélteti. Ilyen módon



a magnetogramok tanulmányozásánál is vezérkönyvül szolgálhat, amelyek kuszaságában a kezdő csak nehezen igazodik el.

A könyv kitűnően megválasztott irodalomjegyzékével jó indításként szolgálhat a magnetoszféra fizika problematikájának megismeréséhez, különösen azok számára, akik ezt a témakört a geomágneses kutatások oldaláról kívánják megközelíteni. Ez a megállapítás azonban nem jelent megszorítást, a könyvet minden fizikus előképzettségű szakember és egyetemi hallgató felhasználhatja a magnetoszféra fizika elsajátításához.

*Dr. Szemerédy Pál*

**H. Zingl, M. Haftel és H. Zankel (szerk.):  
Few Body Systems and Nuclear Forces I.  
Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York**

A szinte hihetetlenül gyors megjelenése miatt rendkívül sikeres „Lecture Notes in Physics” című sorozatának 82. kiadványában a Springer kiadó a néhány részecskés rendszerekről és a mag-erőkről rendezett 8. nemzetközi konferencia anyagainak egy részét adja közre.

A konferencia, amelyet 1978. augusztus 24-től 30-ig tartottak Grazban, egy 1959-ben, Londonban megkezdődött és jelenleg két évenként ismétlődő találkozó sorozat része. A központi téma: két, illetve néhány hadron kölcsönhatása az alacsony és közepes energia-tartományban. A kérdésnek az ad különös aktualitást, hogy — elsősorban a mezongyarakban végzett polarizációs mérések eredményeként — ismét gyorsan szaporodnak az új kísérleti adatok. Hosszabb ideje kelt érdeklődést többek között a relativisztikus általánosítás kérdése, valamint a kéttest- és a soktestprobléma kapcsolata.

A jelen kötet első része a konferencia anyagainak. Mintegy 160, a konferenciára benyújtott és a Nemzetközi Tanácsadó Testület által kiválasztott cikket foglal magába. (A konferencia áttekintést nyújtó fő előadásainak szövegét a második kötet tartalmazza majd.) A szerkesztők az anyagot tíz fejezetre osztották. Ezek közül az első három két hadron kölcsönhatását tárgyalja (többek között kvarkmodellek segítségével is), a negyedik, ötödik és a hatodik a három részecske rendszerrel, míg a hetedik négy hadron együttesével foglalkozik. A következő két fejezetet olyan rendszereknek szentelték, amelyek több, mint négy nukleont tartalmaznak (könnyű és nehéz magok, maganyag, néhány részecskés módszerek alkalmazása más területeken). A záró fejezet az atommag és pionok kölcsönhatását, valamint pionok keletkezését vizsgálja.

A kötet igen sok témát ölel föl, amelyek között nem túl könnyű tájékozódni. Olvasása az egyetemi tanyanyagot messze meghaladó ismereteket követel. Ezért tanuláshoz vagy általános kézikönyvként nem ajánlható. Haszonnal forgathatják viszont azok a szakemberek, akiket egy pontosan körülhatárolt kérdés vizsgálatának 1978-as állása érdekel a néhány részecskét tartalmazó rendszerek témaköréből.

Befejezésül említsük meg ennek a kiváló sorozatnak a szerkeztőit, akik az egyes kötetek méltatása során csak ritkán kapják meg az őket megillető elismerést: a müncheni J. Ehlerst és R. Kippenhahnt, a zürichi K. Heppet, a heidelbergi H. A. Weidenmüllert és a Kölnben dolgozó J. Zittartzot.

*Fái György*

**P. Kramer and A. Rieckers (ed.): Group Theoretical Methods in Physics  
Proceedings, Tübingen 1977  
Springer-Verlag, Lecture Notes in Physics vol. 79.  
Berlin, Heidelberg, New York 1978**

Ez a kötet a VI. Csoportelméleti módszerek a fizikában témájú Nemzetközi Kollokvium anyagát tartalmazza, amelyet 1977 júliusában Tübingenben tartottak az Eberhard—Karls Egyetem ötszázéves fennállásának emlékére.

Átolvassva a kötetet megállapítható, hogy a legkülönbözőbb témákkal foglalkozik, a fizika sok különböző ágával foglalkozó előadás található benne. A csoportelméleti módszerek alkalmazása kapcsolja össze ezeket a munkákat, amelyek a matematikai kutatásoktól a speciális alkalmazásokig terjednek.

A kötet tartalmaz témák szerint csoportosított előadási anyagokat. Tekintsük át ezeket itt témák szerint.

A) Szuperszimmetria és gradált Lie algebrák, V. Rittenberg előadása a Lie szuperalgebrák elemi bevezetését, osztályozását és reprezentációit tekinti át matematikai szempontból. A Lie szuper-



csoport fogalmát is vázolja röviden. S. Ferrara a szupergravitációval, a szuperszimmetria mérték-elméletével foglalkozik. Az elmélet Lagrange megfogalmazását mutatja be és vázolja az alapvető kölcsönhatások egyesített elméletének lehetőségeit. B. Konstantnak csak egy rövid cikke található meg itt, amely a gradált Lie-csoportokon a harmonikus analízist tárgyalja, tekintettel arra, hogy átfogó előadásának anyag más Springer-kiadványban már megjelent.

B) A molekula fizikában felmerülő rendezettség és rendezetlenség fogalmáról.

A. Kerber és E. Ruch bizonyos részleges rendezési relációk matematikai és fizikai vonatkozásait vizsgálták előadásaikban, de a kötet sajnos E. Ruch előadásainak jegyzetét nem tartalmazza. Ezért a fizikai alkalmazásokat csak A. Kerber előadásából ismerhetjük meg. H. Primas előadása általános kinematikai kérdésekkel foglalkozik, H. Frei és H. G. Ünthard pedig a molekulafizikában előforduló nem merev mozgásokkal.

C) A soktest fizika és szimplektikus struktúrák.

S. Sternberg előadása a metaplektikus reprezentációkkal foglalkozik. Az  $SU(2, 2)$  konform csoport ún. létra reprezentációit vizsgálja és megmutatja, hogy nemcsak, hogy a Poincaré-csoport különböző nulla tömegű de tetszőleges spinű reprezentációinak mindegyike kiterjeszthető a konform csoport reprezentációjává, hanem az összes összerakható egy alkalmas szimplektikus csoport egyetlen kétszeresen lefedő reprezentációjává. A. Grossmann a kvantummechanikában előforduló kanonikus transzformációk geometriai kérdéseivel foglalkozik. A magfizikai alkalmazásokat D. J. Rowe és G. J. Rosensteel, valamint P. Kramer előadásaiban találhatjuk meg, az előző a kollektív modellekkel, az utóbbi az összetett részecskékkel foglalkozik. Érdekes észrevenni S. Sternberg előadásának kapcsolatát a szuperszimmetriával.

D) Szimmetriasértés a statisztikus mechanikában, és a térelméletben.

J. L. Birman a kristályokban lejátszódó folytonos fázisátmenetek Landau-termodinamikai elméletnének a csoportelmélettel kapcsolatos részleteit vizsgálja. G. G. Emch egy olyan egzaktul megoldható modellel tárgyal, amelyben részletesen tudja vizsgálni a fázisátmenetek, az egyensúlyhoz való tartás és a szerkezeti stabilitás kérdéseit. L. Michel a rendezett közegben előforduló szimmetriahibák topológiai osztályozását adja a homotópia elmélet segítségével. H. P. Dürr a részecskefizikában előforduló sértett szimmetriákat mint a részecskék soktest szerkezetéből származó szerkezeti szimmetriákat interpretálja.

E) Automaták és rendszerek mint az alkalmazott (fél-) csoportelmélet példái.

C. Lobry a nemlineáris rendszerelmélet új eredményeiről számolt be. Megmagyarázza milyen egy közönséges differenciálegyenlet által vezérelt nemlineáris rendszer, és hogyan lehet azt úgy tekinteni, mint valamilyen félcsoport differenciális hatását a sokaságon. Röviden vázolja a lineáris elméletet, majd a nemlineáris elmélet főbb eredményeit mutatja be és kitér az alkalmazásokra. H. Jürgensen cikkében a csoportok és félcsoportok elméletének automata elméleti alkalmazásairól ír a cikk inkább áttekintő, bevezető jellegű.

F) Renormalizációs csoport és kritikus jelenségek.

J. M. J. van Leuwen körvonalazza a konfigurációs térbeli renormálási csoport fázisátmenetekre és kritikus jelenségekre való alkalmazásait. A módszert a kétdimenziós Ising-modellen mutatja be.

G) Mértékelméletek.

L. O. Raifeartaigh előadásában a mértékelméleteket vizsgálja. Kitér a spontán sértett mérték-elméleti modellekre és a téregyenletek szoliton megoldásait is vizsgálja.

A kollokviumhoz a résztvevők posztterekkel járulhattak hozzá, amelyeken legújabb eredményeiket mutathatták be. A posztterekhez tartozó legfeljebb három oldal terjedelmű összefoglalók hat fejezetben szintén megtalálhatók a kötetben.

A fejezetek címei:

- I. Szuperszimmetria, szimmetria a részecske és a relativisztikus fizikában.
- II. Szimmetria a molekula és szilárdtest fizikában.
- III. Sértett szimmetria és fázisátmenetek.
- IV. Csoportok és dinamikai rendszerek szerkezete.
- V. Csoportok és Lie-algebrák reprezentációi.
- VI. Általános szimmetriák, kvantálás.

A kötet rendkívül érdekes áttekintését adja a csoportelmélet fejlődésének és alkalmazásainak. A cikkek jó részének megértéséhez az egyetemen megszerezhető ismereteken túlmenő speciális ismeretek szükségesek. Tanulságos olvasmány lehet mind matematikus, mind a legkülönbözőbb érdeklődésű fizikus olvasó számára. Úgy tűnik, az ilyen átfogó konferenciák szerencsés vállalkozásnak bizonyulnak.

*Horváth Zsolt*



**S. L. Shapiro (ed.): Ultrashort Light Pulses Picosecond Techniques and Applications  
Topics in Applied Physics Vol. 18.  
Springer-Verlag**

Az 1950-es évek végén, 1960-as évek elején az elektronika ugrásszerű fejlődése lehetővé tette nanoszekundumos időintervallumok mérését. Közvetlenül mérni lehetett tehát atomok és molekulák elektronikus gerjesztett állapotainak élettartamait, melyekről eddig csak közvetett és bizonytalan adataink voltak. Szükségesek is voltak ezek a mérések, hiszen a lézerek megvalósíthatóságának feltétele a felső lézernívónak az alsónál rövidebb élettartama. Ebben az időben pedig a lézer felfedezése, megalkotása volt a cél. A lézer megszületése után néhány évvel az időmérésben megindult fejlődés a rövidebb időintervallumok felé ugrásszerűen meggyorsult a lézerek modusszinkronizált üzemmódjának felfedezésével, a picoszekundumos  $10^{-12}$  sec lézer fényimpulzusok létrehozásával. Amíg a nanoszekundumos időméréssel csak atomok és molekulák időfelbontásos spektroszkópiája volt lehetséges, a pikoszekundumos impulzusokkal a folyadékok szilárdtestek különböző gerjesztettségi állapotai relaxációs idői mérhetők, egyszerűen „centiméterrel”. Ma a legrövidebb fényimpulzus  $\sim 100$  fantoszekundum ( $10^{-15}$  sec) hosszúságú és csak néhányszor tíz fényhullámot tartalmaz. Természetes tehát, hogy az ilyen rövid fényhullámok az anyaggal egészen másképpen hatnak kölcsön, mint ahogy azt a klasszikus optika alapján elvárnánk. Ez már azért is igaz, hiszen ezek a lézerimpulzusok óriási teljesítményűek is ( $P > 1$  GW).

A pikoszekundumos impulzusokat tehát kondenzált anyag belső gerjesztettségeinek mérésére, különböző nemlineáris optikai, elektronikai alkalmazásokban, kémiában és a biológiában használjuk mint vizsgálati eszközt. Erről szól a fenti című cikkgyűjtemény. A könyv első cikke S. L. Shapiro világos, szépen megírt történeti összefoglalása az időmérésről. A második cikket az irodalomból igen jól ismert szerző, D. J. Bradley írta a pikoszekundumos impulzusok előállításai módjairól. Kár, hogy a referált, igen terjedelmes anyag szinte szétrobbantotta a cikk kereteit. Ezért bizony nem a legkönnyebben olvasható. Kétségtelen viszont, hogy minden lényegesebb idetartozó munkát megtalálunk a hivatkozások között. E. P. Ippen és C. V. Shank cikke viszont kristálytisztán írja le a mérési módszereket. Ez a terület különösen gazdag szellemes mérési módszerekben. Való igaz, hálás dolog is erről cikket írni.

A nemlineáris optika a kvantum elektronika egyik fejezete. A pikoszekundumos impulzusok esetén azonban a nemlineáris optika a nem stacionárius nem lineáris optika. Erről szól a D. H. Auston által írt negyedik cikk.

Az ultrarövid impulzusok legjelentősebb alkalmazási területe a folyadékok és szilárdtestek időfelbontásos spektroszkópiás vizsgálata, az ultrarövid impulzusok anyaggal való kölcsönhatásának vizsgálata. Erről a cikket D. von der Linde írta gyönyörű, könnyen olvasható, kitűnő stílusban.

Ezen rövid fényimpulzusok alkalmazása a kémiában és a biológiában még gyakorlatilag a kezdetén tart. A kémiai alkalmazásokról K. B. Eisenthal, míg a biológiában való felhasználásáról A. J. Campillo és S. L. Shapiro írta a referátumot.

A könyv a szokásos Springer kiadvány, szép technikai kivitelű, könnyen olvasható. A könyvet mindazon, különösen szilárdtesttel és folyadékokkal foglalkozó kutatóknak ajánlom elolvasásra, akik modern eszközökkel szeretnék megismerni ezen anyagok gerjesztési kinetikáját, relaxációit és ilyen extrarövid fényimpulussal való kölcsönhatását.

*Bakos József*

**Robert L. Miller (ed.): Flow-induced Crystallization in Polymer Systems  
Midland Macromolecular Monographs Vol. 6.  
Gordon and Breach Science Publishers**

Az Áramlás vezérelt kristályosodás polimer rendszerekben c. könyv a Midland Makromolekulár Monographs sorozat 6. kötete. Az előző kötetek:

1. Trendek a makromolekulák tudományában.
2. Rendezettség polimer oldatokban.
3. Polimerizáció szervezett rendszerekben.
4. Átmenetek és relaxációk molekuláris alapja.
5. Polimer transzport rendszerek.

A jelen kötet az 1977. augusztus 22—26-ig a Midland Macromolecular Institute-ban rendezett „Áramlás vezérelt kristályosodás” c. szimpózium előadásait és az azokat követő vitát tartalmazza.



Az elhangzott előadások:

- A. Peterlin: A kristályosodás jelensége.  
 R. L. Miller: A kristályosodás kinetikai adatainak elemzése.  
 A. J. Penzings: Kristályosodás oldatból.  
 B. Kalb és R. St. John Manley: Cellulóze szálal kristályosodása áramló oldatokból.  
 J. N. Hay: Kristályosodás olvadékból.  
 P. Smith és R. St. John Manley: Polietilén frakciók kvázi binér rendszereinek szilárdulása.  
 T. Amano: Megjegyzés a csoportos lamelláris struktúrák képződéséhez.  
 J. R. Collier, S. L. Chang és S. K. Upadhyaya: Áramlás vezérelt kristályosodás olvadékból csavarextruderrel táplált presszerszámban.  
 W. T. Mead és R. S. Porter: Az extrudált nagysűrűségű polietilén száalai kezdeti morfológiájának befolyása a fizikai és mechanikai tulajdonságokra.  
 J. B. Hare és J. A. Cuculo: Polietilén áramlási kristályosodása hőmérséklet gradienssel rendelkező konvergens kapillárisok által létrehozott áramlási térben.  
 P. D. Griswold, A. E. Zachariades és R. S. Porter: A szilárdfázisú koextrudálás: nagy sűrűségű polietilén példáján bemutatott új technika termoplasztikok ultrahúzására.  
 H. D. Noether: Kristályosítás extrém hőmérsékleti és nyomásgradiensekben.  
 W. B. Black: Merev láncú aromás polimer oldatok, olvadékok és szálak.  
 T. Alfrey: Polimer kristályosodás a rétegkészítéskor alkalmazott kéttengelyű nyújtás esetén.  
 L. Jarecki és A. Ziabicki: Termodinamikailag vezérelt kristályirányítás nyújtott polimerekben.  
 R. S. Stein, M. Hashiyama és M. K. Paspert: Polimér olvadékok stressz-vezérelt kristályosodásának optikai vizsgálata.

Az előadások címéből is látszik, hogy a kötet anyaga elsősorban a műanyagipar területén kutatók számára érdekes és hasznos, hiszen a szálhúzásnál a technológiából fakadó szerkezet kialakulásával, a polimerek kristályosodási kérdéseivel foglalkozik. (V. R.)

**G. W. Cullen és C. C. Wang (szerk.):  
 Heteroepitaxiális félvezetők elektronikus eszközök számára  
 Springer-Verlag, 1978**

A könyv különböző szerzőktől származó hét fejezetből áll, és pedig:

- G. W. Cullen: Heteroepitaxiális szilícium előállítás és tulajdonságai.  
 C. C. Wang: Vegyületfélvezetők heteroepitaxiális növesztése és minősítése.  
 M. T. Duffy: Heteroepitaxiális III—V és II—VI vegyületek készítése és tulajdonságai akusztikus felületi hullám és elektrooptikai eszközök számára.  
 P. I. Zanzucchi: Heteroepitaxiális vékonyréteg félvezetők minősítése szigetelő subsztrátokon.  
 W. E. Ham: Heteroepitaxiális félvezető rétegek elektromos minősítése.  
 S. Berkman, V. S. Ban és N. Goldsmith: A horizontális CVD reaktor gázáram dinamikájának analízise.  
 I. Blanc: Rendezetlenségek, torzulások és diszlokációk Si/Si, Ge/Si, Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> epitaxiális struktúrákban.

A szerzők közös célkitűzése, hogy rámutassanak, mennyire szükséges az anyagtudományban dolgozók és az eszközszerkesztők közötti szoros együttműködés. Maguk mint RCA laboratóriumok munkatársai ezt az utat követték éveken át és azt nagyon hasznosnak találták. Egy eszköz készítése közben olyan technológiai lépések kerülnek alkalmazásra, amelyek mind megváltoztatják az anyag hibaszerkezetét, tulajdonságait. Ezek megismerése, tudományos elemzése az eszköz és főleg annak reprodukálhatósága szempontjából rendkívül fontos. Ma már nem engedhető meg, hogy az alkalmazások, az eszköztervezők függetlenül dolgozzanak az anyagtudomány szakembereitől. A könyvpiacra még nincs ilyen szemléletű könyv, ezért örömmel üdvözlük mindazok a szakemberek, akik az anyagtudomány, ill. eszközfejlesztés területén dolgoznak. Akik pedig epitaxiális félvezetőkkel foglalkoznak, bőséges információt kapnak mind a rétegeltállítás és minősítés, mind az elkalkulások területéről.

Voszka R.



**Rooijmans, C. J. M. (ed.): Crystals Growth, Properties, and Applications. Vol. 1  
Crystals for Magnetic Applications  
Springer-Verlag, Berlin. 1978. ISBN 3-540-09002-9**

A Springer-Verlag 1978-ban megjelentetett egy új sorozatot *Kristályok növesztés, tulajdonságok és alkalmazások* címen.

A sorozat céljának megfelelően áttekinti a kristálynövesztés, a tulajdonságok vizsgálata és az alkalmazások területén elért eredményeket.

Az első kötet *Kristályok mágneses alkalmazások céljára* címmel jelent meg, és a következő öt cikket tartalmazza:

W. Tolksdorff, F. Welz

Mágneses gránátok növesztése magas hőmérsékletű oldatokból.

F. J. Bruni

Gadolinium Gallium Gránát.

M. H. Randles

Mágneses gránátok folyadékfázisú epitaxiás növesztése.

L. N. Demianets

Mágneses oxidok hidrotermális növesztése.

M. Sugimoto

Mágneses spinel egykristályok növesztése Bridgman módszerrel.

Az egyes cikkek jó áttekintést adnak a szükséges kémiai háttérrel, a kristálynövesztés módszereiről és eszközeiről, a növesztés folyamatáról, a kristályok morfológiájáról, hibaszervezetükről, tulajdonságaikról, gazdag irodalmi utalással.

Az egykristályok alkalmazása az elektronikában, lézertechnikában, nemlineáris optikában stb. egyre jobban terjed, ezért szükséges a különböző egykristályok megbízható és reprodukálható előállítását tartalmazó irodalom megjelentetése. A sorozat ezt a hiányt pótolja és hazai kristálynövesztő körökben már az első kötet is a mágneses egykristályok előállításával komoly érdeklődést fog kiváltani.

Voszka R.

**Fazekas Patrik—Gazsó János—Kósa Somogyi István: Amorf félvezetők  
A szilárdtestkutatás újabb eredményei 2. kötet  
Akadémiai Kiadó, Budapest, 1977**

Az amorf szerkezet megismerése, amely kezdetben csak néhány kutató, vagy kutatócsoport kedvelésének, ha úgy tetszik különködésének tűnhetett, az utolsó évtizedben a szilárdtestkutatás homlokterébe került. Érthető ez, hiszen a makroszkopikus méretű szilárd anyagot felépítő atomok „tökéletesen” rendezetlen elhelyezkedése az amorf szerkezetben, a másik végletet jelenti a tökéletesen rendezett kristályszerkezethez képest. Az amorf anyagok új fizikai és kémiai tulajdonságokat ígérnek egyrészt, hiszen ezek a tulajdonságok, amint az jól ismert, az anyagszerkezettel vannak közvetlen összefüggésben. Másrészt, rendelkezésre áll az az elméleti fizikai apparátus és kísérleti-vizsgálati lehetőség, amely képes a távoli rendezettség nélküli anyag tulajdonságainak elemzésére. Sejthető volt, hogy az „ideális” amorf szerkezeten belül hibák, akár hibák rendszere alakulhat ki, s így az amorf anyagoknak sokféle változatával kell számolnunk. Feltételezhető volt, hogy az „ideális” amorf szerkezetnek is — az ideális kristályszerkezethez hasonlóan — több változata, típusa lehet.

Az amorf anyagszerkezet megismerése, adott szerkezetű és tulajdonságú anyagok előállítási módszereinek kidolgozása pedig — az anyagra vonatkozó ismereteink teljesebbé válása mellett s annak természetes következményeként — új tulajdonságú, kedvezőbb sajátosságú vagy akár egészen új típusú elemek, berendezések, használati eszközök gyártásának alapját képezheti.

Az amorf anyagok vizsgálatának területén az elmúlt időben elsődlegesen helyet foglaltak el az amorf félvezetők, jóllehet számos egyéb amorf anyagot, pl. üveg, oxidok, már igen régóta széles körben alkalmazunk. Ennek okát abban lelhetjük, hogy a félvezetők közel tökéletes egykristályainak szerkezetét, szerkezetének hibáit, fizikai tulajdonságait és a bennük végbemenő fizikai folyamatokat jól ismerjük, a mérések eredményeinek értelmezésére jól kidolgozott elméleti modellek állnak rendelkezésünkre. Így az egyik „végletet” jól összevethetjük a másik „véglettel”. Jelenleg úgy tűnik, hogy az amorf félvezetőkre vonatkozó ismereteket, a vizsgálataik során nyert tapasztalatokat és a vizsgálatok céljára kidolgozott módszereket eredményesen lehet felhasználni egyéb amorf szerkezet, pl. amorf fémek, vizsgálatára, tárgyalására is.



Amorf anyagokról beszélve külön figyelemre méltó az is, hogy az amorf szerkezetek stabilizálásának lehetősége, az előállításukra alkalmazott módszerek — a vákuumkondenzáció, a gyors hűtés — olyan anyagok vegyítését is megvalósíthatóvá teszik, amelyek kristályos fázisban nem léteznek. Sajátos összetételt, illetőleg összetétel-eloszlást is ki lehet alakítani.

Az Akadémiai Kiadó gondozásában megjelenő *A szilárdtestkutatások újabb eredményei* sorozat szerkesztő bizottsága a sorozat második kötetét az amorf félvezetőknek szentelte. Az amorf félvezetők széles körű vizsgálata nagy ismeretanyagot halmozott fel mind a szerkezetre, mind a fizikai tulajdonságokra vonatkozóan. Ahhoz is elegendőt, hogy egy összefüggő, átfogó kép kialakítására alkalmas monográfia készüljön. Ilyen igényű s az ismereteket jól rendező kötetet adott kezünkbe az Akadémiai Kiadó.

A kötet két fő részre tagolódik. Az első rész, az 1-től az 5-ik fejezetig az alapfogalmakat, a kísérleti-mérési eredményeket s az azokból levonható következtetéseket, illetőleg az alkalmazás lehetőségeit tárgyalja. A második rész az amorf félvezetők szerkezetére fizikai tulajdonságai leírására kidolgozott modelleket, elméleteket tekintti át.

A szerzők — bevezetesként — a kristályos félvezetők fontosabb, jellemzőbb tulajdonságait, a tulajdonságok leírására felhasznált fogalmakat, alapösszefüggéseket elevenítik fel az 1. Fejezetben.

A 2. Fejezetben az amorf jellemzését, a szerkezetvizsgálati (elsősorban diffrakciós) módszerek, valamint az előállítási módszerek rövid összefoglalását olvashatjuk. A szerzők külön foglalkoznak az amorf és az üvegszerű szerkezettel, a tetraédes kötésű félvezetőkkel és a kalkogén üvegekkel. A hagyományos üvegek szerkezeti modelljeinek rövid tárgyalása igen hasznos, hiszen a folyadék-fázisból történő megszilárdulás, üvegekpződés folyamatát félvezetők esetében is alkalmazzák.

Az elektromos transzportjelenségek vizsgálatával, a mérési módszerekkel és a vezetés lehetséges módjaival foglalkozik a 3. Fejezet. A 4. Fejezetben az optikai tulajdonságokat, a fényelnyelés alapfolyamatait, az egyes színek keletkezésének és értelmezésének módját tárgyalják a szerzők. Röviden bemutatják, hogy az atomok távoli rendezettség nélküli elrendeződése hogyan hat a sáv-szerkezetre. Áttekintik az állapotsűrűsége kidolgozott modelleket s röviden foglalkoznak az optikai jellemzők közötti összefüggésekkel.

Az 5. Fejezet az alkalmazás lehetőségeivel foglalkozik. Utal azokra a kérdésekre, amelyek ebben a vonatkozásban megoldásra várnak. Számos példát mutatnak be az amorf félvezetők — elemi és vegyület félvezetők — felhasználásával készült eszközökre.

A kötet második része, a 6.-tól a 10. fejezetig az amorf félvezetők tulajdonságainak értelmezése, leírására kidolgozott elméleteket foglalja össze. A figyelmet az elektronszerkezetre irányítja.

A 6. Fejezetben az elméletek kidolgozásának alakulását, a nehézségeket vázolják a szerzők s áttekintik az alappengondolásokat, amelyeket az elméletek kidolgozásához általában felhasználtak. Rámutatnak arra a nehézségre is, hogy a kísérletek során előállított és vizsgált anyagok, rétegek valódi szerkezete kevésbé ismert és az egyes kísérletekben nehezen reprodukálható. Ennek következménye az, hogy az újabb és újabb kísérleti-mérési eredmények nemcsak próbára teszik az elméletet, hanem igen gyakran meg is változtatják annak minőségi jellegű kiinduló feltételeit. Ehhez járulnak az utóbbi éveknek azok a felismerései, amelyek már nem kerülhettek be a feldolgozott anyagba, amelyek szerint az amorf anyagok általában egy jellegzetes, kvázi periodikus szerkezeti inhomogenitást mutatnak. Így a minták, amelyeken a méréseket végzik, mind szerkezetben, mind pedig összetételben távol vannak az elméletekben feltételezett ideális, homogén szerkezettől.

A 7. Fejezet a vezetési állapotokkal, a tiltott sáv létezésének kérdésével, a hosszú távú atomi rend hiányának következményével foglalkozik. Ismerteti és elemzi a Waire—Thorpe-modellt. A 8. Fejezetet az elektronlokalizáció kérdésének vizsgálatára szentelték a szerzők, amely az amorf szerkezet, mint véletlen atomi rendszer rácshelyeinek különbözőségével hozható összefüggésbe. Részletesen ismertetik az Anderson-lokalizáció elméletét, s annak jelentőségét.

Az elektronoknak a nem periodikus potenciáltérben való mozgásával foglalkozik a 9. fejezet. Mott és Davis tárgyalásmódját követi. A Cohen—Fritsche—Ovshinsky és a Mott—Davis-modell alapján ismerteti az állapotsűrűség várható alakjait s tárgyalja a vezetőképesség hőmérsékletfüggését.

A 10. Fejezetben a szerzők a lokalizált állapot mibenlétével, sajátágaival, a tetraédes kötésű amorf félvezetők és a kalkogén üvegek közötti különbségek elemzésével foglalkoznak. Áttekintést adnak a fotolumineszcencia és az elektron spin rezonancia módszerrel végzett mérések eredményeiről s azok értelmezéséről, a vezetőképesség hőmérsékletfüggésére a Mott—Davis-modell alapján nyert  $T^{-1/4}$ -es törvény érvényességére vonatkozó tapasztalatokról. Utalnak a szerkezetvizsgálatokkal kimutatott üregek és a lógó kötések közötti kapcsolatra, az előállítás módjának és körülményeinek szerepére.

A kötetnek jó hasznát veheti mindenki, aki áttekintést kíván nyerni az amorf félvezetők tulajdonságairól, az elméletek által nyújtott képről s az elméletek nehézségeiről. Az amorf szerkezet tárgyalásával foglalkozó részek aránytalanul szűkrefogottak. A modellek és a szerkezetvizsgálatok



eredményeinek részletesebb ismertetése teljesebbé tehetné az amorf anyagokról a kötet alapján alkotható képünket. Jobban segíthetné az egyes technológiák és paraméterek hatásának tisztázását, a reprodukált anyagelőállítás feltételeinek kidolgozását.

A szerzők igen szerények voltak a hazai eredmények idézésében. Mindössze egy ilyen közleményt találhatunk, holott a külföldi szerzők összefoglaló dolgozatai is idéznek számos magyar eredményt rendszeresen. Úgy hiszem, a Szilárdtestfizika Újabb Eredményei sorozatnak, amely összegző igényű, az is egyik feladata, hogy számot adjon a hazai eredményekről, összegezve azokat s behelyezve az ismeretek tárházába. Több, korábbi magyar kézikönyv nyújt erre jó példát.

Barna B. Péter

**Siklós Tivadar (szerkesztő): A szilárdtestkutatás újabb eredményei III. kötet.  
Akadémiai Kiadó, Budapest**

Egy ország kutatóit elsősorban azok az eredmények érdeklik, amelyek elérésében maguk is résztvettek, az ország lakóit pedig azok, amelyek felhasználására ipari lehetőségei, bázisai vannak. A szilárdtestkutatás ma kiemelt tudományos feladat. Helyes volt tehát, hogy a Magyar Tudományos Akadémia Matematikai és Fizikai Tudományok Osztálya az Akadémia alapításának 150 éves jubileuma alkalmával a szilárdtestek kutatása terén elért eredményekről számoltatta be kutatóit. Ezeknek az előadásoknak az anyaga ez a könyv. Értéke a kötetnek, hogy tartalmazza az azóta elhunyt Szigeti György akadémikus személyi visszaemlékezésekkel élénkített, a hazai, a felszabadulás utáni fényforráskutatás történetét. További érdekessége, hogy az azóta szintén elhunyt Pataki György előadása Bodó Zsolt sajtó alá való rendezése folytán benne lehet a kötetben. — Különösen a 27 szerző (köztük még két azóta elhunyt társszerző: Pócza Jenő és Kiss József) 16 előadása a fényforráskutatás, a wolfram-, a rétegszerkezet kutatások, az ionimplantációk, a SIM mérési eredményei értelmezésének a kérdése, a kondenzált rendszerek instabilitása, a mágneses tulajdonságok, kohászati kérdések, szigetelő és elektrooptikai egykristályok előállítása és hibaszerkezetének vizsgálata, a hazai atomreaktorok üzembehelyezésekor azonnal meginduló neutronspektroszkópia vizsgálatok, az információátvitel problémái, a termoanalízis mind helyet kapnak a kötetben. Ezekhez a jelen kutatásokhoz hozzákapsolódnak az egyes előadások bevezetőjében, illetőleg az Előszóban ismertetett történelmi előzmények.

Véleményem szerint, a sorozat ezen harmadik kötete akár első is lehetett volna, s szükségképpen nem tartalmaz mindent, több elméleti és egyes kísérleti téren elért mai hazai eredmények már csak a terjedelem korlátai miatt sem szerepelhettek. Ezek és az ebben a kötetben több esetben csak érintett, említett kutatások részletesebb ismertetése épp úgy feladata majd a sorozatnak, mint egyes, nálunk még nem kutatott, de nagy lehetőségeket megcsillantó elméleti és kísérleti vizsgálatok ismertetése. (T. Gy.)

**D. Casasent (szerk.): Optical Data Processing.  
Applications Topics in Applied Physics 23. kötet.  
Springer-Verlag, Berlin**

A munka jól sikerült összefoglalása a címben megjelölt kutatási, alkalmazási eredményeknek. A szerkesztő H. J. Caulfielddel együtt írt, mintegy bevezetőnek szánt cikkében az alapfogalmakat ismerteti. Ezt egészíti ki a kötet többi szerzői által bevezetőben adott rövid történelmi áttekintések: „előzetes információk”.

A fizikus, elméleti és kísérleti egyaránt, szinte elcsodálkozik tudománya ezen ágának rohamos fejlődésén. Az alapkutatások széles alkalmazási lehetőségei a lézerek, a holográfia, az optikai képfelismerések, az optikai szűrők, processzorok, digitális módszerek, a fotogrammetria, optikai korreláció és korrelátorok, roncsolásmentes próbák és mérték meghatározások, szendvics holografikus interferometria, a koherens optika orvosi biológiai alkalmazásai, elektrooptikai átalakítók stb. mind-mind ismertetésre kerülnek.

Az anyag feldolgozási módja megkövetel bizonyos fizikai és matematikai alapismereteket, de a jól szerkesztett ábrák és a jó felvételek megkönnyítik az eligazodást. Az egyes fejezetek végén levő bőséges irodalom elősegítheti a részletesebb tájékozódást, a tárgymutató pedig az éppen bennünket érdeklő anyagrézst könnyű megtalálását.

A könyv témáit érdemes volna részletesebben feldolgozni egyes természettudományos ismeret-folyóiratainkban. (T. Gy.)



**J. T. Fraser, N. Lawrence, D. Park (ed.): The Study of Time III.**  
**Springer-Verlag, New York—Heidelberg—Berlin. 1978. 727 oldal**

A kötet az International Society for the Study of Time 3, az ausztriai Alpbach-ban, 1976-ban megrendezett konferenciájának anyagát tartalmazza. A 29 előadás tartalmi szempontból az alábbi tárgykörökbe rendeződik.

1. *Prolegomena* (Az idő tanulmányozásában előforduló metafizikai előfeltevések. — Nyelvi szintek az idő elemzésében.)

2. *Fizika*. (Alább részletesebben.)

3. *Élő órák*. (Biológiai órák és szinkronizálásuk. — Élő órák a tengeri szervezetekben. — Biológiai és társadalmi változások mérése.)

4. *Szubjektív idő*. (Az idő, az emlékezet és a befolyások. — A jövő perspektívája és az „én” erőssége.)

5. *Múlt, jelen és jövő*. (A jelen objektivitása. — A kezdet és a vég elgondolásai a kozmológiában. — A múlt és a jövő. — Az idő fogalmának határai.)

6. *Társadalom*. (Időrendezés és az idő strukturálása nagy szervezetekben. — Az egyén és a társadalom. — A város ritmusai. — Az idő tanulmányozása Csehszlovákiában, Lengyelországban és a Szovjetunióban.)

7. *Az irodalom és a művészetek*. (Regény: az idő nyelve: Thomas Mann és James Joyce. — Az örök pillanat: D. H. Lawrence *The Rainbow* és *Women in Love* c. regényei. — Az idő változó ikonográfiája. — Az idő a kelet és a nyugat nagy civilizációinak zenei tudatában. — Poiesis: Az idő és a művészi leírás.)

8. *Kereszténység — hinduizmus — mithraizmus*. (Az idő, a tér és a szabad akarat: a Leibniz—Clarke-levelezés. — Az idő fogalma a mithraizmus mítoszaiban. — Az idő és az áldozat.)

Mint látható, a konferencia az idő fogalmával és szerepével kapcsolatos igen sokirányú megközelítési lehetőség szemlét segített elő. Jelen ismertetés mégis elsősorban a fizikai vonatkozású cikkekre kívánja a figyelmet elsősorban felhívni.

*O. Costa de Beauregard*: A XX. század harmadik vihara: az Einstein-paradoxon.

*P. C. W. Davies*: A téridő szingularitások a kozmológiában és a fekete lyukak párolgása.

*D. Finkelstein*: Túl az időn: felfedezések a kvantumtopológiában.

*P. T. Landsberg*: Termodinamika, kozmológia és a fizikai állandók.

*K. Ono*: A természet két alaptörvényéről és az idő szerepéről a téridőkontinuumban.

*F. Christensen*: A térszerű idő elmélete.

Külön kiemelnénk, hogy az általában érdekes cikkek közül legaktuálisabbnak és legtanulságosabbnak — a fizika-blokkból — *O. Costa de Beauregard*, *P. C. W. Davies* és *P. T. Landsberg* tanulmányait tartjuk, megjegyezve, hogy minden érintett szakma, de elsősorban a filozófusok számára érdekes a tanulmánykötet. Minthogy az idő fogalma mind az egyén, mind a társadalom tevékenységeiben sokrétűen jelentkezik, az itt felsorakoztatott nézetek — olykor vitát váltva ki — hozzájárulhatnak a fogalom mélyebb és árnyaltabb megértéséhez.

*Abonyi Iván*

**P. C. Sabatier (editor): Applied Inverse Problems**  
**Lecture Notes in Physics, vol. 85.**  
**Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York. 1978**

A francia Centre National de la Recherche Scientifique által szervezett „Az inverz problémák interdiszciplináris tanulmányozása” c. munkaértekezletének (Montpellier) anyagából gazdag válogatást nyújt a kötet. Inverz problémák akkor jelentek meg a fizikában, amikor a mérési eredményeket egy elméleti modellbe rendezve a modell kívánta állandó(k) értékét kellett meghatározni, (például az általános gáztörvényben  $p$ ,  $V$  és  $T$  adataiból az  $R$ -et). Azóta általános megfogalmazásban *direkt* probléma annak a leképezésnek a keresése, amely az elméleti paraméterek halmazát a kísérleti eredményekre vetíti, *inverz* probléma megoldása során — a mért, vagy számított — „eredmények” tág halmazának elemeihez meg kell mutatni, hogy létezik az elmélet paramétereit az eredményekre vetítő leképezés (egzisztencia-kérdés) és melyek ezek a leképezések (konstrukció-kérdés). Ezután következik a leképezések tulajdonságainak (stabilitás, meghatározottság, hibahatárok, regularizáció) vizsgálata. A kötet összegyűjti azokat az előadásokat, ill. referátumokat, amelyek több szakterület számára érdekesek, a közismert módszereken jelentősen túlmutatnak és az ismeret-



anyag interdiszciplináris alkalmazott jellegét domborítják ki. A 23 tanulmány általános matematikai módszerekről, geofizikai, adatfeldolgozási, optimalizálási, optikai, szóráselméleti, spektrálméleti, magfizikai és részecskefizikai problémákat tárgyal. A függelék az „Alkalmazott inverz problémák” fontosabb irodalmát sorolja fel.

*Abonyi Iván*

**Aldo Bressan: Relativistic Theories of Materials**  
**Springer Tracts in Natural Philosophy, Vol. 29.**  
**Springer Berlin—Heidelberg—New York 1978. p. 290.**

Az általános relativitáselmélet gravitációs egyenletei, kiegészítve azokkal a tagokkal, amelyek a térben jelenlevő anyag állapotváltozásait és kölcsönhatásait foglalják össze az energiaimpulzus-tenzorban, lehetővé teszik általános kovariáns anyagi egyenletek struktúrájának felismerését. Ezt először az elektromágneses tér és az egyszerűbb dielektrikum-típusok esetére tárták fel. Az itt nyert információk fontos kalauzként szolgáltak az anyagi közegek és az elektromágneses erőter kölcsönhatásának további vizsgálatában. Az energiaimpulzus-tenzor Eckarttól származó felbontása termodinamikailag is értelmezhető tagokra elindította azt a folyamatot, ami a rugalmas, viszkózus, termoelektro-magneto-elasztikus rendszerekre éppen e könyv szerzőjének jelentős hozzájárulásaként teljesedik ki. E típusú vizsgálatok a fenomenológiai kontinuum-szemléletet veszik alapul és a relativisztikus kinematika és dinamika kovariáns törvényeiből levont következtetésekkel tágitják a termodinamika ún. fundamentális relációját, hogy a makroszkopikus rendszerek viselkedésének leírásában a konstitutív egyenleteket meg lehessen fogalmazni. Fontos eredmények az irreverzibilis folyamatok termodinamikáját éppúgy érintik, mint az egyes tipikus folyamatok relativisztikus korrekcióinak felismerését és lehetővé teszik egyes paradox kérdések — pl. a hő végtelen terjedési sebessége — magyarázatához, az ellentmondások feloldásához vezető út egyengetését. A problémakör aktualitását látni engedi a könyv irodalomjegyzéke, ami tanúskodik arról, hogy ez a kutatási terület hogyan terebélyesedik az utóbbi évtizedekben.

*Abonyi Iván*

**G. dell' Antonio, S. Doplicher and G. Jona-Lasinio:**  
**Mathematical Problems in Theoretical Physics**  
**Lecture Notes in Physics, Vol. 80.**  
**Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York. 1978. p. 438.**

A kötet az 1977-ben Rómában megrendezett „Az elméleti fizika matematikai problémái” c. nemzetközi konferencia előadásait tartalmazza. Ez a Nemzetközi Matematikai Unió által támogatott konferencia a harmadik olyan, amelyek az elméleti fizika újabb irányjaiban fellépő matematikai problémákat a matematikusokkal, az új matematikai módszereket az elméleti fizikusokkal kívánja megismertetni szervezett formában. A római konferencia a kötet közreadásával is hangsúlyozni kívánta, hogy nem elkülönített szekcióülésekkel próbálja fenntartani a szűkebb szakterületek elszigeteltségét, hanem éppen elő kívánja segíteni mind a fizikában, mind a matematikában, mind a fizikában és a matematikában az információ hatékony cseréjét. Ezzel is elő akarja mozdítani a fiatalok célszerű orientálását. A kötet a mértékterek, a fázisátmenetek, az ún.  $C^*$ -algebrák, a kvantumtérelmélet, a szóráselmélet, a renormalizációs csoport, a turbulencia, valamint a differenciál-geometria egyes kérdései köré csoportosuló 41 cikkből áll, és a nagy dinamikai rendszerek, a folyadékok dinamikája, a statisztikus mechanika a turbulencia, a szolitonok és a lineáris fejlődéselmélet, valamint az algebrai topológia területén dolgozó kutatók számára tartalmaz érdekes új szempontokat, eredményeket. Meg kell jegyeznünk, hogy tanulságos próbálkozás egy ilyen sokrétű, sokakat érdeklő konferencia anyagot aránylag olcsó, papírkötésű formában közreadni.

*Abonyi Iván*

**G. Ludwig: Die Grundstrukturen einer physikalischen Theorie**  
**Hochschultext**  
**Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York. 1978. 261 old.**

A modern kvantumelmélet értelmezésével kapcsolatos munkásságáról ismert szerző ebben a kötetben adja közre azokat az eredményeit, amelyeket a fizikai elméletek alapvető struktúráinak tanulmányozása során az utóbbi években elért. Ez a könyv részletesebben kifejti és továbbfejleszti az 1970-ben publikált „Deutung des Begriffs *physikalische Theorie* und axiomatische Grundlegung der



Hilbertraumstruktur der Quantenmechanik durch Hauptsätze des Messens" c. könyvében kidolgozott elméletét. Nem véletlen, hogy éppen a kvantummechanika alapproblémáinak elemzésével foglalkozó szerző vállalkozik ilyen feladatra, mert éppen a kvantummechanikában merült fel a leg-súlyosabb formában a fogalomalkotás kérdése. Szerző által bemutatott struktúranulmány feladata olyan új módszert találni, ami lehetővé teszi az értelmezés problémájának egzaktabb megközelítését, a rivális értelmezések jobb összehasonlítását. A fogalomalkotás és az axiomatikus bázis tulajdonságainak matematikai struktúrákra vetítése egy fizikai állításkalkulus kialakítása végett e könyvben lényegében az egyetemi hallgatók számára is hozzáférhető módon történik, ebben a szerzőnek nemcsak kutatói, hanem oktatói tapasztalatai is nagy szerepet játszanak. A könyvet melegen ajánljuk nemcsak a kvantummechanika, hanem a fizika tágabb területei és a filozófia és természet-tudományok kapcsolatai iránt érdeklődőknek is.

*Abonyi Iván*

**A. V. Gurevich: Nonlinear Phenomena in the Ionosphere**  
**Springer-Verlag, Berlin, 1978. Physics and Chemistry in Space 10.**

A plazma egyik fő jellegzetessége, hogy nemlineáris jelenségek már viszonylag gyenge elektromos terek esetén is megjelennek benne. A plazma jellemzőitől függően alapvetően kétféle nemlineáris jelenségsorozat létezik. A termális nemlinearitás a plazmában terjedő elektromágneses hullám elektromos tere (E) által gyorsított elektronok és a nehéz részecskék ütközése miatt lép fel. Ez a plazma dielektromos állandójának és vezetőképességének E-től való függéséhez vezet. Így a plazma elektrodinamikai folyamatai, különösen a rádióhullámterjedés, nemlineárisak lesznek (a szuperpozíció elve nem teljesül stb.). Az ionoszférában az ilyen fajta nemlinearitás játssza a főszerepet. A nemlinearitások másik fajtája ütközésmentesnek tekinthető plazmában lép fel, mikor a külső elektromos tér (pl. rövid rádióimpulzus) által perturbált plazmatartomány méretei jóval kisebbek az elektronok közepes szabad úthosszánál.

Az ionoszférikus rádióhullámterjedés nemlineáris jelenségei már fél évszázada ismertek. Elméletük kidolgozásával és fejlődésével nyilvánvalóvá vált, hogy erős rádióhullámokkal az ionoszféra állapota (hőmérséklete és elektronsűrűsége) észrevehetően befolyásolható. A rádióadók teljesítményének és irányítottságának növekedése 1970 körül tette lehetővé az ilyen kísérleteket, melyek során az ionoszféra által nyújtott természetes plazmafizikai „laboratóriumban” különféle új fizikai jelenségeket észleltek. Ezek kutatása nem csak tudományos, hanem gyakorlati (rádiótechnikai) szempontból is érdekes, és nagyon gyorsan fejlődik.

A szerző, aki a SZUTA Lebegyev Fizikai Intézetének Elméleti Osztályán dolgozik, a kérdés-kör egyik legkiválóbb elméleti szakembere. Könyvében átfogóan és világosan tárgyalja a plazma erős rádióhullámokkal való módosításának elméletét, különös tekintettel az ionoszférára.

A jó fizikai képet adó bevezetés után az első fejezetben az ütközésses plazma kinetikájával foglalkozik, váltakozó elektromos tér jelenlétében. Ezt a rádióhullámok nemlineáris terjedésének és kölcsönhatásának és a csatlakozó effektusoknak leírása követi homogén és inhomogén plazma eseteire. Az utolsó fejezetben az önfókuszáló (vagy modulációs), rezonáns és parametrikus instabilitások gerjesztését írja le. A tárgyalás alapvetően elméleti jellegű, de a szerző röviden mindenütt kitér a fontosabb mérési eredményekre is. A könyv nagyon ajánlható a rádióhullámterjedés és plazmafizika terén dolgozó szakembereknek.

*Tarcsai György*

**Landolt—Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships**  
**in Science and Technology. New Series.**  
**Group II., Volume 9, Part c1 Magnetic Properties of Free Radicals**

A szerves gyökökkel foglalkozó publikációk száma az utóbbi időkben olyan nagy mértékben szaporodott, hogy az 1965-ben megjelent II/1 kötet eredetileg négy kötetre tervezett kiegészítése is kevésnek bizonyult. Így a harmadik kiegészítő kötetet további két részre osztották, mely első kötetet, a c1 kötet nitrogén atomon lokalizált spinű szerves gyökök  $g$  faktorait és hiperfinom kölcsönhatási tényezőit tartalmazza. Utóbbiak elsősorban biológiai rendszerekben spinszondaként történő alkalmazásukkal, továbbá rövid élettartamú gyökök kimutatásával kapcsolatban tettek szert jelentőségre.

A kötetben található egyes gyököket elsősorban kémiai szempontok alapján csoportosították. Az átfogó anyagregiszter a d kötetben fog megjelenni. Az 1066 oldal terjedelmű jelen kötet kb. 10 000 nitrogén atomot tartalmazó gyököt tárgyal. A könyv két részből áll. Az első rész (180 oldal)



N-centrált gyökökkel, a második rész nitroxid gyökökkel foglalkozik. Utóbbi részben számos különleges, pl. szilil, germil, foszfo- molideno- és kobalto-nitroxid is helyet kapott. Az egyes vegyületeknél közli a gyökök előállításával kapcsolatos információkat, a mátrixot, ill. oldószert, a mérési módszert, a g-faktor, ill. a hiperfinom tényező értékét és végül az irodalmi forrást.

A könyv általános érdeklődésre tarthat számot a szerves kémia számos területén, de elsősorban ott, ahol a szerves termikus és fotokémiai reakciók mechanizmusának és a rövid élettartamú közbeeső termékek szerkezetének felderítése áll az érdeklődés középpontjában. (R. K.).

**Landolt—Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships  
in Science and Technology, New Series.  
Group III., Volume 12. Part a Magnetic and Other Properties of Oxides  
and Related Compounds**

Ha a jelzett vegyületcsoport egy alcsoportját, a gránátokat tekintjük és pusztán utóbbiak lézertechnikai alkalmazására gondolunk, azonnal világossá válik, milyen nagyjelentőségű anyagokkal állunk szemben. Számos, egészen különleges tulajdonságuk, mint pl. alkalmasságuk a mágneses buborék memóriák készítésére vagy pl. fotoindukált permeabilitásváltozásaik a technika legkülönbözőbb területein sokrétű alkalmazásukat teszi lehetővé. Az utóbbi időben megjelent publikációk nagy száma feltétlenül szükségessé tette egy magas színvonalú gyűjteményes munka megjelentetését. A kötet, mint az 1970-ben megjelent III/4 kötet kiegészítése, éppen ezt az űrt hivatott betölteni és az 1976 végéig megjelent közlemények adatait dolgozza fel.

A kötet két részre oszlik. Az első rész a gránátokkal foglalkozik és három fejezetből áll. Az első fejezet (1—48. old.) a gránátok krisztallográfiai és strukturális adatait tartalmazza. A második fejezet (53—235. ol.) a vasgránátok mágneses, magnetoelasztikus, elasztikus, optikai, termodinamikai és elektromos tulajdonságaira vonatkozó adatokat közli. A harmadik fejezet (265—360. o.) hasonló szempontok alapján tárgyalja a nem vas alapú gránátokat. A második részben (368—482. o.) a perovszkitok és hasonló strukturájú vegyületek krisztallográfiai és mágneses tulajdonságaival kapcsolatos adatok találhatók.

A kötetnek a sorozatban megjelent egyéb kötetektől megkülönböztető sajátága az, hogy viszonylag szűk vegyületcsoportot tárgyal igen változatos fizikai tulajdonságok alapján. Az egyes fejezeteket bevezető elméleti összefoglalók ezért különösen értékesek. Jellemző pl. hogy optikai abszorpciós spektrumok, Mössbauer spektrumok, cirkuláris dikroizmus, ferromágneses rezonancia, spinhullámok, ESR és NMR adatok mellett hőkapacitás, hővezetőképességi és egyéb, ionokkal szennyezett kristályokra vonatkozó adatok is helyet kaptak.

A kötet általános tudományos jelentőségén felül a hazai szilárdtestkutatás főirányainak ismeretében megkülönböztetett érdeklődésre tarthat számot. (R. K.)

**H. H. Kausch: Polymer Fracture  
Springer, 1978. 332 oldal 180 ábrával, 667 hivatkozással**

A könyv témája a polimerek szakadásához vezető folyamatok vizsgálata. A polimerek felhasználóit elsősorban az érdekli, milyen igénybevételeknek tehetők ki ezek a szerkezeti anyagok, azonban erre a kérdésre csak az igénybevételek során végbemenő szerkezeti változások ismeretében tudunk megfelelő választ adni. A könyv a szilárd polimerek szupermolekuláris szerkezetének rövid leírása után a deformáció fenomenológiai és molekuláris leírását adja, majd összefoglalja a különböző szakadási elméleteket. Az összefoglalások viszonylag rövidek, de rendkívül színvonalasak, így pl. megfelelő irodalmi hivatkozásokkal alátámasztva ismerteti a Hosemann-féle parakristályos rács-elméletet és tárgyalja a különböző kutatók által kidolgozott, a szakadás sebességére vonatkozó elképzeléseket.

A szakadási jelenségek megértéséhez szükséges mélységben ismerteti a kovalens kötések kvantumkémiai alapjait, az intramolekuláris kötések erősségét és azokat a tényezőket, amelyek befolyásolják a kötési potenciált.

Az így megfelelően felkészített olvasót ezután a könyv megismerteti az egyetlen molekulalánc terhelésekor lejátszódó folyamatokkal: az elasztikus deformációnál fellépő entrópia-, és a lánc vázszerkezetének deformációjával járó energiaváltozásokkal. A valóságban nem egyetlen lánc terhelődik, hanem láncoktegek viselkedését kell leírni. A szerző ezért részletesen leírja a szekunder vegyértékek szerepét a láncok összetartozásában, a láncok átrendeződését a kristályrács ellenében külső erők hatására normál és termikusan aktivált állapotban.



Külön fejezetet szentel a könyv az ESR spektroszkópiai módszerek alkalmazásának a mechanikai hatásra létrejövő szabad gyökök tanulmányozásában, majd ismerteti a szabad gyökök képződéséhez vezető reakciókat, ill. azok változását a terhelés, az idő és a hőmérséklet függvényében.

A polimer tönkremehet repedés, nyakképződést követő plasztikus folyás vagy a plasztikus deformáció után bekövetkező szakadás következtében, így a repedési szilárdság, folyási szilárdság és a törőszilárdság között különbséget kell tenni és mindegyik szakadási mechanizmusa is egymástól eltérő.

A molekulaláncok szakadása akkor jellemző a polimer szakadására, ha nagy mértékben orientált láncokról van szó, így pl. jól nyújtott szálaknál, így ezek deformációját és szakadási mechanizmusát tárgyalja a szerző, majd külön vizsgálja az orientálatlan polimereknél létrejövő deformációt, tartós folyást (creep) és kifáradást. Ilyen mechanizmus szerint szakadnak a gumyszerű anyagok is. Külön rész foglalkozik a környezeti hatásokkal, így a nedvesség, oxigén, vegyszer ill. sugárzás okozta mechanikai tulajdonságváltozásokkal.

A molekulaláncok szerepe a heterogén töréseknél más jellegű. Ilyenkor az anyag inhomogenitása révén a feszültségek koncentrációja megy végbe, előbb hajsza-, majd makro-repedés lép fel: ezeknek fenomenologikus leírása és a jelenségek molekuláris interpretálása szerepel a „molekulaláncok heterogén törésben” c. befejező fejezetben.

A könyv korszerű, jó összefoglalást ad a polimerek töréséről és mindazok számára ajánlható, akik információt kívánnak kapni a felszíni jelenségek mögött meghúzódó molekuláris szintű szakadási, csúszási és kifáradási jelenségekről.

*Bodor Géza*

**Richtmayer, Robert D.: Principles of Advanced Mathematical Physics**  
**Texts and monographs in physics. Volume 1.**  
**Springer-Verlag. New York—Heidelberg—Berlin. 422 oldal**

A szerző abból indul ki, hogy a fizika megértéséhez szükséges matematikai alapismereteknek teljes egészükben a fizika oktatásába kell beépülniük, és nem szerezhetők meg azokból a standard matematikai kurzusokból, amelyeket ma általában fizikus hallgatóknak tartanak. A fizikus hallgatóknak ugyanis a modern matematika csaknem valamennyi ágában el kell jutniuk az alapvető fogalmak megértéséhez, érteniük kell a különböző matematikai ágakban kidolgozott elvek kapcsolatát, és át kell látniuk ezek fizikai következményeit. Ennek a szellemnek megfelelően a szerző, felhasználva többéves matematika-, illetve fizikaoktatási gyakorlatát, kiegyensúlyozott bevezető tárgyalását adja a modern matematikai fizika alapvető eszközeinek.

A jelen, első kötet (amelyet egy második kötet követ majd) központi témái: Hilbert- és Banach-terek, disztribúciók és funkcionálanalízis alapjai. Részletesen tárgyalja a lineáris operátorok elméletét (spektrum, rezolvens stb.), különös tekintettel a klasszikus és a kvantum-fizika differenciálegyenleteiből származó operátorokra. Egyéb témák: valószínűségelmélet és szerepe a kvantummechanika felépítésében, időbeli evolúciók és félcsoport-elmélet, a hidrodinamika nemlineáris problémái.

Ezen első kötet megfelelő alapul szolgálhat fizikus hallgatók matematikai képzéséhez a fenti témákban. (A matematikai fizika területén dolgozó kutatóknak és aspiránsoknak további mélyebb ismeretek szerzéséhez ajánljuk B. Simon—M. Reed a legújabb kutatásokról is számot adó sorozatát: *Methods of Modern Mathematical Physics*, Academic Press, amelynek eddig négy kötete jelent meg.) (Sz. D.)

**K. Binder (ed.): Monte Carlo Methods in Statistical Physics.**  
**Springer. "Topics in Current Physics". 7. kötet. Berlin—Heidelberg—New York.**  
**1979. 376 oldal, 91 ábra**

A Monte Carlo-módszert sok szabadsági fokkal rendelkező rendszerek számítógépes szimulálására, utánzására, lejátszására dolgozták ki. Széles körűek alkalmazásai a tudományos kutatásban, így a fizikában is. A statisztikus termodinamikában Metropolis és munkatársai pl. már 1953-ban sikeresen tanulmányozták e módszerrel kemény golyókból álló „folyadékokat”. A mai, fejlettebb számítógépek számos izgalmas alkalmazásra adnak lehetőséget. A módszerrel eldönthető, milyen jól írja le a modellt a fizikai jelenségeket (a szimulálással nyert eredmények és a kísérletileg mért adatok összehasonlításával). Másrészt ellenőrizhető — az ugyanabból a modelltől kiinduló analitikus elméletek eredményeivel való összehasonlításal —, hogy meddig érvényesek az analitikus tárgyalás



során tett approximációk. A cikkgyűjtemény egyik fő célja, hogy világossá tegye azt a kölcsönhatást, amely egyrészt a számítógépes szimulálás és a kísérlet, másrészt az elmélet között kialakul. A cikkeket a téma vezető szakemberei írták felkérésre. A gyűjtemény először a módszer háttérét és hatékony gyakorlati megvalósításának tudományát adja, majd számos aktuális alkalmazási példát tárgyal. Ilyenek: sűrű gázok, folyadékok, plazmák termodinamikája; fémötvezetek és mágneses rendszerek rövid- és hosszútávú rendezettségének vizsgálata — ideértve a kritikus viselkedést is; kvantum-folyadékok alapállapotainak leírása; mikroszkopikus folyadék-cseppek struktúrája és termális elmélete; relaxációs jelenségek és diffúzió szilárd közegben; a kristálynövekedés és más fázistranszformációk kinetikája; felületek szerkezeti és mágneses tulajdonságai, a felületeken való abszorpció kinetikája; rendezetlen rendszerek (üveg, amorf mágnes) szerkezeti és termális tulajdonságai. (Sz. D.)

**E. Lohrman: Hochenergiephysik  
Teubner Studienbucher**

A nagyenergiájú fizika utóbbi 20—25 éve az anyag alapvető építőköreiről számos drámaian új felfedezést hozott. Elegendő, ha a paritás és CP-sértés, illetve az anyag ritkaságnak, valamint „charm”-nak nevezett tulajdonságainak felismerését, vagy a kvarkmodell sikereit említjük, vagy pedig a gyenge kölcsönhatásban talált semleges áramokra gondolunk, melyek a gyenge és elektromágneses kölcsönhatás egyesítését magában foglaló elmélet alapjait erősítik.

A könyv célja, hogy bevezesse az olvasót ezen fejleményekbe. Ezért tartalmazza a kísérleti eredményeken kívül az interpretálásukhoz szükséges legalapvetőbb elméleti tudnivalókat is. Előzetes ismeretként csak az alapozó előadásokon elhangzó atomfizikai és kvantummechanikai fogalmakat tételezi fel. Előadásmódja tömör és lényegretörő — szinte hihetetlen, hogy alig 200 oldalon ekkora mennyiségű ismeretanyagot tud közölni. Rendkívül előnyösnek tartom, hogy nemcsak a kísérleti eredményeket, hanem legtöbbször a kísérleti berendezés lényegét is megismerhetjük.

Az első fejezet az egész témakör rövid áttekintését adja, itt találjuk az alapvető kölcsönhatások (erős, elektromágneses, gyenge), valamint az elemi részek „állatkertjének” rövid jellemzését; valamint a megmaradási törvények és szimmetriák felsorolását a köztük fennálló összefüggésekkel együtt.

A második fejezet a — legjobban ismert — elektromágneses kölcsönhatással foglalkozik. A Feynman-gráfok bevezetése után az elektronok, pozitronok és fotonok között lezajló különböző szórási és annihilációs folyamatokat tárgyalja. A fejezetet a kvantum-elektrodinamika precíziós ellenőrzéseinek és határainak tárgyalása zárja.

A harmadik fejezet az erős kölcsönhatást mutatja be. A klasszikus, alapvető ismeretek — parciális hullámok módszere, unitaritási relációk, optikai tétel, rezonanciák — után az SU(3) multiplett-szerkezetet és a kvarkmodell lényegét ismerteti. Itt esik szó az újonnan felfedezett negyedik kvarkról és az ebből felépülő részecskékről (pszion-család) is. Az elektron-foton-hadron kölcsönhatás kapcsán nemcsak ezen részecskék közötti rugalmas és mélyen rugalmatlan szórási folyamatokról és a skálaviselkedésről kapunk képet, hanem betekintést nyerünk az értelmezésüket nyújtó partonmodellbe is.

Az utolsó fejezet a gyenge kölcsönhatásról szól. A gyenge kölcsönhatás különböző csatolási állandóit (Fermi, ill. Gemov—Teller) a mag  $\beta$  bomlásokon keresztül vezeti be, majd a maximális paritás sértés tényén keresztül jut el a V—A-elméletig. Részletesen ismerteti az áram-áram kölcsönhatás elvi részeit (megmaradó vektoráram, oktett áramok) és ezek kísérleti bizonyítékait. Végül külön alfejezet tárgyalja a semleges kaonok fizikáját a CP sértéssel, valamint a semleges áramok felfedezését szolgáltató kis és nagyenergiájú neutrínó szórási folyamatokat.

*Palla László*

**T. Mayer—Kuckuk: Atomphysik  
Teubner Studienbücher: Physik B. G. Teubner Stuttgart, 1977**

A könyv, melynek anyaga körülbelül egy féléves bevezető atomfizikai előadásnak felel meg, elsősorban olyan hallgatók számára íródott, akik most ismerkednek a kvantummechanikával. Ennek megfelelően csak klasszikus mechanikai, elektrodinamikai és elemi analízisbeli ismereteket tételez föl.

A szerző a kísérleti alapokból kiindulva vezeti be a legegyszerűbb kvantummechanikai fogalmakat. Ez az előadásmód jól tükrözi azt a tényt, hogy történetileg a kvantumelmélet az atomfizikából fejlődött ki. A könyv célja elsősorban az, hogy megismertessen az atomfizika legfontosabb jelenségeivel. Ez, szűkreszabott terjedelmét is figyelembe véve, csak úgy érhető el, hogy a bonyo-



lultabb matematikai levezetéseknek csak a főbb pontjait mutatja be. Mindenütt megtaláljuk azonban az eredmény részletes fizikai interpretációját. Ez a felépítés a szerző véleménye szerint sem helyettesítheti a szokásos kvantummechanikai stúdiumokat, de azok jó kiegészítésül szolgálhat. Azáltal, hogy más szempontok szerint mutatja be az anyagot, olyanok számára is hasznos lehet, akik az elméleti bevezetést már hallgatták.

A könyv bevezető fejezete az atomról alkotott mai elképzelésünk kialakításában alapvetően fontos kísérleti előzményeket ismertet. A részecske-hullám kettősség bemutatása után jutunk el a Schrödinger-egyenletig. Illusztrációként egyszerű, egydimenziós rendszereket vizsgál a szerző. A harmadik fejezet a hidrogén atommal foglalkozik, részletesen elemelve az egyes állapotok hullámfüggvényeinek tulajdonságait. Ezt követi a mágneses nyomaték és az elektronspin kvantummechanikai leírásának bevezetése, majd ismét visszatérünk a hidrogén-atomhoz, de most már azzal a céllal, hogy annak részletesebb struktúráját is megismerjük. Itt kerül sor a finomszerkezet, hiperfinomszerkezet és a Lamb-eltolódás bemutatására. A hatodik fejezet a fénykvantumok kibocsátását (indukált és spontán emisszió, természetes vonalszélesség) és a Zeeman-effektust tárgyalja egyatomos rendszerben. A következőben azonos részecskék rendszerének általános törvényszerűségeit taglalja a szerző. Konkrét példaként a héliumatom szerepel. A nyolcadik fejezet témája a többelektronos atom. A Hartree-féle módszer megismerése után a periódusos rendszer leírása következik, majd néhány atom spektrumának föltérképezése zárja a fejezetet. Ezt követi az elektron-burok mágneses és elektromos térbeli viselkedésének leírása. Az utolsó rész a sokatomos rendszerek fénykibocsátási folyamatainak áttekintése, mely magában foglalja a mézer és a lézer működési elvét is. A könyv olvasása során tehát egyre növekvő szabadsági fokú rendszerek megismerése felé haladunk.

A könyvet elsősorban a természettudományi karok hallgatói, ill. az atomfizika és a kvantummechanika tanításában érdekelt oktatók forgathatják haszonnal.

*Tél Tamás*

**R. P. Huebner: Magnetic Flux Structures in Superconductors  
(Mágneses Fluxus Szerkezetek Szupravezetőkből)  
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1979**

Az utóbbi években számos kiadó viszonylag nagyszámú könyvet jelentetett meg szupravezetés területéről. Ezek szerzői általában a szupravezetés kutatásának egy-egy területén kiemelkedő eredményeket elérő kutatók voltak és a vizsgált problémakörökről többnyire nagyon jól sikerült műveket publikáltak. Közülük megemlíthető Saint-James, Sarma, Thomas: „Type II Superconductivity”, Campbell, Everts: „Critical Currents in Superconductors”, vagy Ullmaier „Irreversible Properties in Superconductors” című könyve.

A Springer Kiadó most nyilvánvalóan ezek sorát akarta gyarapítani, amikor a „szilárd testek tudmánya” sorozatában Huebener könyvét 1979. elején kibocsátotta.

A mű áttekintést ad a szupravezetés mágneses jelenségeiről, amelyek legalább olyan fontosak, mint az elektromos tulajdonságok. Habár a cím csak a fluxus struktúrákat említi, a könyv tematikája természetesen ennél jóval szélesebb, és a szupravezetők mágneses jellemzőinek kutatásában szerepet játszó lényeges kérdések nagy részét érinti. Ily módon a leírt időszak is meglehetősen hosszú, 1933-tól 1978-ig tart. Ez egyrészt jó, mert a jelenségek bizonyos fajta áttekintését megadja, másrészt természetesen előfordul, hogy az érdemi kifejtést a helyszűke akadályozza.

A könyv 14 fejezete az alábbi témaköröket tartalmazza: 1. Bevezetés (a legkiemelkedőbb aspektusok rövid összefoglalásával). 2. Az I-es típusú szupravezetők mágneses tulajdonságai. 3. Ginzburg—Landau-elmélet. 4. A II-es típusú szupravezetők mágneses tulajdonságai. 5. Vékony rétegek. 6. Kísérleti technikák. 7. Lorentz-erő és fluxus mozgás. 8. Speciális kísérletek. 9. Termikus erők és fluxus mozgás. 10. Időfüggő elméletek. 11. Fluxus rögzítés. 12. Fluxus kúszás és fluxus ugrás. 13. Elektromos zajok. 14. Áramindukált ellenállásos állapot. Ezen belül több, mint 80 címszó szerepel a mintegy 250 oldalas könyvben, ami arra utal, hogy a szerző a tárgyalt terület sokoldalú és sokszempontú áttekintésére törekedett.

Ezt esetleg a minél szélesebb olvasótáb or kialakításának igénye indokolta.

Egy jó összefoglalás kidolgozása mindezekképpen szükségesnek tűnik már csak amiatt is, mert a szupravezetés az utóbbi években figyelemre méltóan behatolt az iparba, és ma már technológiai kategóriákat vonz. Olvasói lehetnek tehát mindazok, akik a gyorsan fejlődő műszaki alkalmazások bázisát szeretnék birtokukba venni, de a kutatók és az e terület iránt érdeklődő, előképzett egyetemi hallgatók számára is hasznos kiegészítő könyvként szolgálhat.

A nagyon egyszerű (fotografikus), de izléses, szép (és nyilván gyors és olcsó) nyomdai eljárás és általában a mű gondos kivitele (szép ábrái) a kiadó és a nyomda precíz munkáját dicséri.

*Kirschner István*



E. Becker: Technische Strömungslehre.  
4. kiadás; 152 lap. B. G. Teubner, Stuttgart, 1977

Valószínűleg nemcsak a recenziens lepődött meg a könyv előszavában található, alábbi mondatok olvastán: „Zavarban voltam, ha az előadásokhoz német nyelvű tankönyvet akartam hallgatóimnak ajánlani. Eltekintve attól, hogy a legtöbb, szóba jöhető könyv mind a terjedelme, mind pedig az ára miatt nem felel meg az egyetemi hallgatók igényeinek, e könyvek legnagyobb hiányosságának azt tartom, hogy az áramlástan alapvető törvényeit felületesen és zavarosan ismertetik.” Meglepő ez az állítás, minthogy — német nyelven is — sok, jónak tartott áramlástani tan- és szak- könyv van forgalomban.

Ernst Becker könyvének áttanulmányozása után az olvasó meglepetése átalakul, ill. más irányúvá alakul. Alig akar hinni a szemének, hogy ilyen kis terjedelmű könyvecskében ennyi ismeretanyag zsúfolható össze. És szó sincs az ismeretanyag zsúfoltságáról: a szerző az ismeretek közlésére, a jelenségek leírására olyan mesteri módszert talált, amilyen valóban ritka még a legtöbb tankönyvekben is. Ritka és aligha utánozható. (A recenziens a könyv tárgyalásmódja a híres „Landau—Lifsic”-sorozatra emlékeztette.)

Nincs a könyvben „alapegyenletek leszármaztatása”, nincsenek benne szisztematikus „levezetések”, de megtalálható benne pl. az impulzustétel alkalmazása az áramlástan legfontosabb eseteire, a hidrodinamikai nyomóerő meghatározása több speciális esetre, a szárnyrács körül kialakuló áramlás leírása, a viszkoziméterek működésének (és használatának) az ismertetése, a csőfal ellenállása, a határrétegek legfontosabb tulajdonságai stb. Összenyomható folyadékok áramlása (és a benne terjedő hanghullámok ismertetése) csak a néhány oldalas utolsó fejezetben szerepel.

Az „elméleti” beállítottságú olvasó talán hiányolhatja az alapegyenletek összefoglaló ismertetését és azok szisztematikus alkalmazását a speciális esetekre. Őt is kárpótolja azonban az egyszerű (szinte bűvészi) megfontolásokból nyert eredmények és alkalmazások tárháza, az a lehető legjobb értelemben vett fizikai szemléletmód, amely a művet a legjobb tankönyvek sorába emeli.

Szabó János

A. R. Bishop, T. Schneider (ed.): Solitons and Condensed Matter Physics  
Proceedings of the Symposium on Nonlinear (Soliton) Structure and Dynamics in Condensed Matter  
Oxford, England, June 27-29, 1978

A múlt század elején sok kísérlet történt arra, hogy a klasszikus pontmechanika differenciálegyenleteinek megoldását kvadraturára vezessék vissza. Poincaré és Brun negatív eredményei azt mutatják, hogy a teljes integrálhatóság kivételes tulajdonság, amellyel csak speciális rendszerek rendelkeznek. Úgy tűnt, hogy ezek vizsgálata nem tarthat számot különösebb érdeklődésre.

A vízhullámok mozgását leíró nemlineáris parciális differenciálegyenlet ( $u_{xxx} + uu_x + u_t = 0$ ) — a Korteweg de Vries-egyenlet — példa olyan végtelen szabadsági fokú rendszerre, amely teljesen integrálható, és megoldásai rendkívül stabilitást mutató megoldások (szolitonok) kompozíciói. Ezen az önmagában is érdekes tényen túl az egyenlet jelentőségét az adja, hogy megoldásai egyben a Schrödinger-egyenlet inverz szóródási problémájának is megoldásai. Az ún. Klein—Gordon-egyenlet ( $u_{xx} - u_{tt} = F(u)$ )  $F(u)$  speciális választásai esetén teljesen integrálható, és a megoldások (kinkek) hasonló stabilitási tulajdonsággal rendelkeznek.

A Korteweg de Vries-egyenlet segítségével több klasszikus pontmechanikai rendszer teljes integrálhatóságát sikerült igazolni. Nem véletlen, hogy a szolitonok szinte valamennyi fizikai diszciplínában termékenyen alkalmazhatók mintapéldákká váltak, s ez a „nemlineáris” fizika létjogosultságát igazolja.

A szolitonoknak a szilárdtestfizikában betöltött szerepével foglalkozott az a szimpozium, amelynek előadásai könyv alakban megjelentek a Springer Series in Solid-State Sciences sorozatban (8. kötet).

A matematikai szempontok rövid összefoglalói után a könyv a szolitonok alkalmazásainak széles skáláját mutatja be.

A klasszikus és kvantum statisztikai fizika általános kérdései mellett számos speciális problémáról tájékoztatnak a cikkek; pl. szupravezetés, szuperfolyékonyság, molekuláris dinamika, speciális típusú fázisátmenetek.

A dolgozatok jelentős része közül számítógépes kísérletek útján nyert igen szemléletes eredményeket, s több dolgozat érdekes kísérleti adatokat is tartalmaz.

Krámlí András



**K. Bethge (szerk.): Experimental Methods in Heavy Ion Physics**  
**Lecture Notes in Physics sorozat, № 83.**  
**Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1978**

A nehéz részecskékhez (atomok, ionok, komplex magok) kapcsolódó, kölcsönhatásaikat feltárni kívánó kutatások kinőttek kezdeti, próbálkozásokkal, tévedésekkel teli korszakukból. Áttekintve a jelenlegi helyzetet megállapíthatjuk, hogy a nehéz részecskékkel való kísérletekben kezdetben a könnyű részecskékre kidolgozott módszerek áttüztetésével próbálkoztak, hamar napvilágra kerültek azonban ennek korlátai s mind határozottabban rajzolódott ki az új technikára és mérési módszerekre vonatkozó igények. Szerte a világon az utóbbi időben egyre sokasodnak a nehéz részecskék alkalmazására tervezett berendezések, kísérleti összeállítások, a téma és alkalmazási területe folyamatos fejlődésben van. Éppen ezért nehéz lenne teljes áttekintést adni; helyesebb talán néhány jól kiválasztott területen felmérni mai ismereteinket. Ezt próbálja teljesíteni ez a kötet.

Az első fejezet (szerző: *H. Winter*) a nehéz-ionos kísérleti technika legfontosabb elemeivel, az ionforrásokkal foglalkozik. Áttekinti az ionforrásokban lejátszódó alapvető fizikai folyamatokat, a fő paramétereket és azok mérési módszereit. Külön figyelmet szentel az ionforrások készítésénél szükséges technológiának, ezzel kapcsolatban a megbízhatósági és élettartam kérdéseknek. Ismerteti a főbb ionforrás típusokat. Sajnálatos, hogy innen kimaradt a széles körben alkalmazott ívkisüléses források ismertetése. Tárgyalja ellenben ez a fejezet a lazer-es ionforrásokat, melyek a legutóbbi évek termékei, továbbá hangsúlyozott módon foglalkozik a többszörösen töltött ionok előállításának problémáival. Befejezésül áttekintést ad a várható fejlődésről, az újabb ötletekről. Ezek között figyelmet érdemel az a törekvés, ahol nagy elektronsűrűségek alkalmazásával a tértöltés teljes kompenzáására törekszenek. (203 hivatkozás.)

A nehéz-ionok anyagokon való áthatolásával foglalkozik a második fejezet. (Szerző: *H. Schmidt—Böcking*.) Bevezetésül áttekinti a kérdés történetét Bohr 1948-as úttörő munkáitól a jelenig bezárólag, majd összefoglalja az elmélet állását a különböző közelítéseket. Részletesen foglalkozik az anyagba behatoló töltött részecskék energiavesztési folyamataival, annak főbb formáival, összehasonlítva a kísérleti és elméleti adatokat. Részletesen tárgyalja az anyagban fellépő fékező erők mérési módszereit, elsősorban abból a szempontból, milyen elméleti elvárások igazolására alkalmasak. Sajnálatos, hogy a kísérleti technikáról gyakorlatilag nem közöl információt. (149 hivatkozás.)

Külön fejezet — a harmadik; szerző: *B. Martin és H. Stelzer* — írja le a nehéz-ion detektorokat. Foglalkozik a Si, a gáztöltésű (egy- és sokszálas proportionális, ionizációs kamra jellegű), vékonyréteg, sec. elektronemissziós detektorokkal. Ellentétben az előző, elméleti jellegű fejezettel, ez a rész kifejezetten kísérleti, sőt technológiai jellegű, bár röviden foglalkozik az egyes detektor fajták elméletével is. Részletes utalásokat tartalmaz a különböző detektorok készítése (pl. gáz tisztasági és tisztítási problémák) és felhasználása során felmerülő gyakorlati kérdésekre. (176 hivatkozás.)

A nehéz-ionos kísérletek targetjei — különösen nagyobb energiáknál — sok gondot okoznak, így érthető, hogy ezt a problémakört külön fejezet tárgyalja. (Szerző: *J. Yntema és F. Nickel*.) A szerzők elsősorban a kísérletek során a target-fóliákban fellépő folyamatokat ismertetik, többnyire összehasonlítva az elmélet által előrejelzett adatokat a mért értékekkel. (Sugárkárosodás, porlódás, gőzölés, hőmérséklet-növekedés stb.) Külön rámutatnak a nagy áramsűrűségnél figyelembe veendő szempontokra, valamint a targetek homogenitásának fontosságára. (19 hivatkozás.)

Befejezésül egy rövid fejezet ismerteti (szerző: *T. Walcher*) a reakciótermékek analizálására alkalmas spektrográfokat. Rámutat az elméleti alapokra és egyben tárgyalja azokat — az elméletileg előrelátható — problémákat, melyek limitálják az ilyen jellegű mérések felbontását. Végül ismert két berendezést. (26 hivatkozás.)

A kötet egészen bizonyos ellentmondásosság érezhető, mind az anyag feldolgozását, mind az egyes fejezetek súlyát illetően. A legátfogóbb, legáttekinthetőbb az első fejezet, egészséges egyensúly van az elméleti tárgyalás és a kísérleti módszerek ismertetése között. Ez a könyv legkidolgozottabb része, melyet tükröz a fejezet igen jó tartalomjegyzéke is. Sajnálatos, hogy a többi fejezethez ilyen nem készült s ez az áttekintést megnehezíti. A detektoros fejezetben az elmélet rövidre fogott és a kísérleti, gyakorlati problémák dominálnak, míg a többi fejezetek lényegében a kísérleti módszerek elméleti vonatkozásait fejtegetik. Mindezek ellenére vagy ezzel együtt, jó eligazodást találhatnak azok, akik valamelyik részterületet művelik és a csatlakozó problémaköröket szeretnék áttekinteni.

*Pásztor Endre*



**I. A. Sellin (szerk.): Structure and Collisions of Ions and Atoms**  
**Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1978.**  
 Topics in Current Physics sorozat

A gyorsítókkal az utóbbi években űzött atom és molekula fizika a nehéz részecskék alkalmazásával új arculatot kapott. Ezzel együttjárt a nehéz ionokkal foglalkozó magfizika igen jelentős fejlődése. Jelenleg szinte tetszés szerinti ionizációs, ill. gerjesztési állapotok állíthatók elő kb. a kriptonig bezárólag és sokszorosan ionizált, ill. gerjesztett állapotok a nehezebb elemeknél. Ezzel új technikai eszközök állnak rendelkezésre a foton és elektronspektroszkópiában a többszörösen gerjesztett állapotok vizsgálatára, az ütközési jelenségek tanulmányozására stb. Ezt a helyzetet tükrözi a kötet is. Tárgyal néhány, a közelmúltban felfedezett jelenséget, elsősorban az ún. szuperkritikus elektromos terekben. (Quantum Electrodynamics in Strong and Supercritical Fields; S. J. Brodsky, P. J. Mohr.)

Természetesen a sokszorosan ionizált atomok önmagukban egész sor kérdést vetnek fel. Ezek szerkezetével, a különböző jelenségek, tulajdonságok  $Z$  függésével foglalkozik egy fejezet. (Relativistic Effects in Highly Ionized Atoms, L. Armstrong, Jr.)

Az atomok és ionok rugalmatlan ütközéséhez ismerni kell a nukleonok és elektronok Coulomb-térbeli mozgását leíró elméletet olyan feltételek mellett, amikor a tömegközépponti rendszerbeli energia messze meghaladja az elektronok kötési energiáját. E kérdések tárgyalásával kezdődik az ütközésekkel foglalkozó fejezet (Theory of Inelastic Atom-Atom Collisions, J. S. Briggs, K. Taulbjerg), mely mind a kvantum-mechanikai, mind klasszikus tárgyalást ad.

A külső és belső héjakban az ion-atom ütközések során elektron emisszióval fellépő jelenségekkel foglalkozó fejezet a target ionizációjától az Auger-spektrumokig szinte teljes áttekintést ad. (Excitation in Energetic Ion-Atom Collisions Accompanied by Electron Emission. N. Stollerfoht.)

Külön érdekes és régen művelet terület a gerjesztett állapotokból származó sugárzások vizsgálata. Az erről szóló fejezet nem csak a kérdés — különböző aspektusok szerinti — elméletével, hanem a kísérleti technikával is foglalkozik. (X-Ray Production in Heavy Ion-Atom Collisions. P. H. Mokler, F. Folkmann.)

A néhány száz Å vastag targetek kitűnő lehetőséget nyújtanak a gerjesztett állapotok élettartamának és az ehhez csatlakozó egyéb paraméterek meghatározásában. E módszerrel egészen gyors bomlások is mérhetők. A kísérleti elrendezések, valamint számos mérés adatainak ismertetése található ebben a fejezetben. (Extensions of Beam Foil Spectroscopy, I. A. Sellin.)

A befejező rész a szilárdtestekben létrehozható folyamatokat tárgyalja a channelinget állítva az élre, de fontos helyet biztosít a belső héjak ionizációjának is. Ez a kitűnő, modern elméleteket, kísérleti technikát és eredményeket összefoglaló kötet összesen 773 irodalmi hivatkozást tüntet fel.

*Pásztor Endre*

**H. Dachs (ed.): Neutron Diffraction**  
**Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1978**

A kondenzált anyagok atomi léptékű térbeli szerkezetéről az atomok méretével és távolságával összemérhető hullámhosszú sugárzás interferenciaszórásának — diffrakciójának — tanulmányozásával nyerhetjük a legközvetlenebb információt. A röntgendiffrakciót már több, mint fél évszázada elterjedten alkalmazzák a szilárd anyagok szerkezetének meghatározására, a termikus neutronok diffrakciója viszont csak a nukleáris reaktorok elterjedésével az utóbbi 25–30 évben vált közismert szerkezetvizsgálati módszeré.

A neutrontdiffrakció sokkal költségesebb módszer, mint a röntgendiffrakció, a kétféle szórási folyamatot összehasonlítva azonban a neutronszórásból nyerhető új információ mennyisége minden kétséget eloszlat a neutrontdiffrakciós módszer létjogosultságát illetően. A röntgensugarak a szilárd anyagot felépítő atomok elektronjain az elektron-foton kölcsönhatás következtében az atom elektronjainak számával monoton növekedő mértékben szóródnak, a neutronok pedig egyrészt mint nukleonok, az atomok magján a rendszámmal nem monoton függvény szerint változó mértékben szóródnak, másrészt mint mágneses momentummal rendelkező részecskék az atomok elektronfelhőjének kompenzálatlan mágnesezettségű részével, vagyis a mágneses anyagok atomi mágneses momentumaival lépnek kölcsönhatásba. Polarizálatlan neutronnyaláb alkalmazásával a nukleáris és a mágneses szórás egymástól független, a kétféle járulék intenzitás szerint adódik össze a szórási képben, míg a polarizált neutronokkal a kétféle szórás között interferencia lép fel és a nukleáris és mágneses szórás amplitúdói adódnak össze.

Nyilvánvaló tehát, hogy a kondenzált anyagok szerkezetének kutatásában a neutrontdiffrakció mind a röntgendiffrakciós módszer kiegészítéseként, mind attól független módszerként számos



különleges alkalmazási lehetőséget rejt magában, és még nem mondhatjuk el, hogy a lehetőségek mindegyikét számba vettük. A jelenleg ismert legfontosabb lehetőségek számbavételét kísérli meg a Springer-Verlag kiadónak a *Topics in Current Physics* sorozatban megjelent *Neutron Diffraction* című könyve Hans Dachs szerkesztésében 9 összefoglaló jellegű fejezetben, 10 szerző közreműködésével.

Az első fejezet a neutrondiffrakció elvi alapjainak összefoglalása.

A második fejezet a polarizált neutronok újszerű alkalmazási lehetőségeit taglalja. A konvencionális „fel” és „le” polarizált neutronok jelentőségét a mágneses anyagok kutatása terén szinte csak mellékesen említi, beleértve a nukleáris és a mágneses szórás tökéletes szétválasztására alkalmas „polarizáció analízis” módszert is. Sokkal nagyobb figyelmet szentel a nyaláb polarizációját lokálisan és meghatározott módon befolyásoló eszközökkel végzett kísérleteknek és a precesszálo polarizáció alkalmazási lehetőségeinek. Ebben a fejezetben örömmel és büszkeséggel nyugtázhatjuk, hogy honfitársunk, Mezei Ferenc eredményei a széles spektrumú polarizált neutronnyalábok előállítása („supermirror”), a nyaláb polarizációjának meghatározott szögű elforgatása (Mezei spin-turn coil) és az újszerű alkalmazási területek felkutatása (neutron spin-echo) terén is nagyon jelentős nemzetközi elismerést vívtak ki.

A harmadik fejezet a röntgen- és neutrondiffrakciós adatok összevetésének jelentőségét emeli ki a kristályos anyagokban az elektronsűrűség deformációjának és a hidrogéntartalmú anyagok elektronsűrűségének a pontos meghatározása céljából.

A negyedik fejezet a szilárd anyagok mágneses szerkezetének meghatározásával foglalkozik, különös tekintettel a csoportelméleti módszerekkel kapható mágneses szerkezeti modellek alkalmazására.

Az ötödik fejezet a neutronok kisszögű és diffúz szórásának alkalmazhatóságát bizonyítja az atomi és mágneses szempontból amorf, rendezetlen, részben rendezett és rácshibákat tartalmazó anyagok kísérleti vizsgálatára.

A hatodik fejezet a fázisátalakulások és kritikus jelenségek vizsgálatában elért elméleti és kísérleti eredményeket tekinti át.

A hetedik fejezet a diffrakciós szerkezetvizsgálat olyan lenyűgöző területére, ti. a biológiai anyagok szerkezetének meghatározási módszereibe nyújt betekintést, ahol a kívánt eredmény eléréséhez modern, nagy fluxusú reaktor, nagy teljesítményű röntgendiffraktométer, kifinomult mérési technikák, munkaigényes biológiai, biokémiai és izotóptechnikai preparálási eljárások együttes alkalmazására van szükség.

A nyolcadik fejezetben szó esik a folyadékok és amorf anyagok párkorrelációs függvényének meghatározásáról a neutronszórás szerkezeti tényezőjének mérése alapján.

A kilencedik, utolsó fejezet írja le a neutronok dinamikus diffrakciójának jelenségét tökéletes egykristályokban. Ez a jelenség igen finom neutronfizikai, neutronoptikai és kristályfizikai effektusok vizsgálatára nyújt lehetőséget.

Az egész könyv a lehetőségekhez viszonyítva jól összefogott koncepció szerint, egységes stílusban íródott. Nem célja a neutrondiffrakcióval elért eredmények ismertetése, inkább a kísérleti technikák bemutatására összpontosít. Csupán a teljesség kedvéért hiányolhatunk egy rugalmatlan neutronszórásról és a kondenzált anyagok kollektív gerjesztéseinek (fononok, magnonok) vizsgálatáról szóló fejezetet.

Mindent egybevetve, a neutronszórás kutatási módszerként alkalmazó szilárdtestfizikusok hasznos kézikönyvet, a téma iránt érdeklődő kutatók és egyetemi hallgatók gondolatébresztő összefoglaló munkát vehetnek kezükbe ezzel a könyvvel. (K. Gy.)

G. Alefeld and J. Völkl. (ed.): *Hydrogen in Metals, Vol. I. Basic Properties, Vol. II. Application-Oriented Properties.*  
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1978

A szilárdtestfizika fejlődését az utóbbi évtizedekben az új anyagok előállítása, új kísérleti módszerek kifejlesztése és a szilárdtest kutatások eredményei iránt megnyilvánuló ipari és technológiai érdeklődés növekedése jelentős mértékben ösztönözte. A szilárd fém-hidrogén rendszerek kutatásában mindhárom ösztönző tényező szerephez jut. A kifinomult mintaelőállítási módszerek alkalmazásával a hidrogén oldékonyágára, diffúziójára és a fémhidrogén rendszerek fázisátalakulásaira vonatkozó eredmények reprodukálhatósága egyre pontosabbá vált, és ezeknek a jelenségeknek a vizsgálata az új mérési módszerek széleskörűbb alkalmazását tette szükségessé.

A fém-gáz rendszerek, amelyek önmagukban is érdekesek, az alap kutatás szempontjából néhány új fizikai jelenség jó modellanyagának bizonyultak. A Pd-H rendszer a nem-sztöchiometrikus



vegyületek közül az első, amelyen egyensúlyi állapotban méréseket végeztek. Ugyanehhez a rendszerhez fűződik a fémek sáv-modelljeinek kémiai folyamatokra való első elméleti alkalmazása. A fém-gáz rendszerekben a diffúzió jelensége a kis aktivációs energia, a nagy diffúziós állandó és izotópeffektus miatt szobahőmérséklet alatt és egyensúlyi rendszerekben jól tanulmányozható. A hidrogén rács-rácsfolyadék fázisátalakulása fémekben azon ritka esetek egyike, amelyekre a másodrendű fázisátalakulások Landau-féle molekuláris tér elmélete egzaktul alkalmazható és a fázisátalakulás a rugalmas kölcsönhatások következtében jön létre.

Az alapkutatási szempontok mellett a hidrogén hatására bekövetkező keményedés jelensége, a fém-hidrogén rendszereknek a hasadási és fúziós reaktorokban, fűtőcellákban, energiatároló és -továbbító rendszerekben való alkalmazása a jövő technológiai fejlődés szempontjából jelentős.

A Springer-Verlag kiadó kétkötetes könyve a szilárd fém-hidrogén rendszerek gyorsan fejlődő kutatási területének problémáit és eredményeit foglalja össze. Az első kötet az alapkutatási, a második az alkalmazásokkal kapcsolatos szempontokat emeli ki:

Az első kötet jelentős része foglalkozik a rugalmas kölcsönhatások és a fázisátalakulás elméletével, a hidrogén atomok körül kialakuló feszültségtérrel és a rácsrezgésekkel. A továbbiakban a fémek elektronszerkezetének, elektromos és mágneses tulajdonságainak hidrogén oldódás hatására bekövetkező változásait tárgyalja, külön fejezetet szentelve a Mössbauer-effektussal végzett kísérleti vizsgálatoknak. A kötet második fele a hidrogén diffúziójának elméleti és kísérleti problémáival foglalkozik, a kísérleti fejezetekben kiemelve a mag mágneses rezonancia, a kvázi-elasztikus neutronszerzés, a mágneses tulajdonságok, a diffúziós állandó és izotóp effektus mérésével nyerhető eredményeket, valamint a hidrogén atomok magja helyett müon részecskék alkalmazását a diffúzió jelenségének összehasonlító vizsgálatára.

A második kötet fontos tudnivalókat tartalmaz a fém-hidrogén rendszerek gyakorlati alkalmazásai iránt érdeklődők számára. Ismerteti a Nb, Ta és V fémek nem-sztöchiometrikus hidridjeinek és deuteridjeinek fázisdiagramját, a fázisok szerkezetét és metallográfiai tulajdonságait, valamint a mintaelőállítási módszereket. Az alkalmazások szempontjából nagyon fontos Pd-H rendszer és a nagynyomású hidrogén atmoszférában előállított fém-hidrogén rendszerek hasonló tulajdonságait külön fejezetek taglalják. A kötet második felében a fémekben történő hidrogéntárolásnak, a fém-hidrogén rendszerek szupravezetésének, az elektromos tér és a hő hatására bekövetkező hidrogéntranszportnak, valamint a hidrogénnek a fém rácshibáin való megkötődésének (trapping) elméleti és gyakorlati kérdéseit tárgyalják részletesen a társszerzők.

A gondos szerkesztői munka eredményeként ezzel a kétkötetes tanulmánygyűjteménnyel a fém-hidrogén rendszerekben végzett kutatások legújabb eredményeinek átfogó összefoglalását veheti kezébe az olvasó, és meggyőződhet arról, hogy ennek az anyagcsaládnak a jelentősége a jövőben egyre inkább növekedni fog. (K. Gy.)

**P. Hautojärvi (szerkesztő): Positrons in Solids**  
**Topics in Current Physics, volume 12.**  
**Springer Kiadó, Berlin, Heidelberg, New York, 1979**

A pozitron fizika az 1950-es évek elején jelentkezett és indult fejlődésnek. Ettől kezdve évről évre nőtt a tárgykörrel foglalkozó publikációk száma. A növekedés itt is, mint a tudomány más területein, közel exponenciális és így az eddig megjelent publikációk nagy része a 70-es években született. Az egyre növekvő irodalom igényli a magas színvonalú összefoglaló, rendszerező munkákat is. Egy ilyen könyvet tarthat most kezében az olvasó. A szerkesztő és a szerzők — mindannyian a pozitron fizika nemzetközileg is elismert képviselői — nem vállalkoztak, nem is vállalkozhattak a pozitron annihiláció valamennyi alkalmazási lehetőségének kimerítő ismertetésére, hiszen az messze meghaladná egy kb. 250 oldalas könyv kereteit.

Az első fejezetet a szerzők bevezetőnek szánták, amely felöleli az összes kísérleti technikát és az alkalmazási lehetőségeket. Ezek után a könyv azok számára is érdekessé válik, akik korábban nem foglalkoztak pozitron fizikával. Ezek után az egyik legelterjedtebb és legérdekesebb alkalmazási lehetőségről olvashatunk részletesen, amely nem más, mint az elektronok impulzussűrűségének meghatározása fémekben és ötvözetekben.

A következő két fejezetben a másik frekvenciát kutatási területéről, a fémek rácshibáinak pozitronos vizsgálatáról olvashatunk, mind kísérleti, mind elméleti aspektusból. Végül az utolsó fejezet az ionkristályokról szól, részletesen tárgyalva a pozitronok és szincentrumok kölcsönhatásait is.

A könyv szerzői: P. Hautojärvi, A. Vehanen, P. E. Mijnarends, R. N. West, R. N. Nieminen, M. J. Maninen és A. Dupasquier.

Minden fejezet végén részletes irodalomjegyzék található. (B. Á.)





## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Janszky József</i> : A diszlokációs terek hatása a ponthibákon lokalizált elektronokra és rezgésekre	411
<i>Mayer-Böricke Claus U.</i> : Az óriásrezonanciák kísérleti vizsgálata könnyű magokban, makroszkopikus és mikroszkopikus vonatkozások	465

## KÖNYVISMERTETÉSEK

<i>A. Nishida</i> : Geomagnetic diagnosis of the magnetosphere	495
<i>H. Zingl, M. Haftel, és H. Zankel</i> (szerk.): Few Body Systems and Nuclear Forces I	496
<i>P. Kramer and A. Rieckers</i> (ed.): Group Theoretical Methods in Physics Proceedings	496
<i>S. L. Shapiro</i> (ed.): Ultrashort Light Pulses. Picosecond Techniques and Applications	498
<i>R. L. Miller</i> (ed.): Flow-induced Crystallization in Polymer Systems	498
<i>G. W. Cullen és C. C. Wang</i> (szerk.): Heteroepitaxiális félvezetők elektronikus eszközök számára	499
<i>C. J. M. Rooijmans</i> (ed.): Crystals Growth, Properties and Applications. Crystals for Magnetic Applications	500
<i>Fazekas Patrik—Gazsó János—Kósa Somogyi István</i> : Amorf félvezetők	500
<i>Siklós Tivadar</i> (szerk.): A szilárdtestkutatás újabb eredményei III. kötet	502
<i>D. Casasent</i> (szerk.): Optical Data Processing	502
<i>J. T. Fraser, N. Lawrence, D. Park</i> (ed.): The Study of Time III	503
<i>P. C. Sabatier</i> (ed.): Applied Inverse Problems	503
<i>Aldo Bressan</i> : Relativistic Theories of Materials	504
<i>G. dell'Antonio, S. Doplicher and G. Jona-Lasinio</i> : Mathematical Problems in Theoretical Physics	504
<i>G. Ludwig</i> : Die Grundstrukturen einer physikalischen Theorie	504
<i>A. V. Gurevich</i> : Nonlinear Phenomena in the Ionosphere	505
<i>Landolt-Börnstein</i> : Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology	505
<i>H. H. Kausch</i> : Polymer Fracture	506
<i>Richtmayer, Robert D.</i> : Principles of advanced Mathematical Physics	507
<i>K. Binder</i> (ed.): Monte Carlo Methods in Statistical Physics	507
<i>E. Lohrman</i> : Hochenergiephysik	508
<i>T. Mayer-Kuckuk</i> : Atomphysik	508
<i>R. P. Huebener</i> : Magnetic Flux Structures in Superconductors	509
<i>E. Becker</i> : Technische Strömungslehre	510
<i>A. R. Bishop, T. Schneider</i> (ed.): Solitons and Condensed Matter Physics	510
<i>K. Bethge</i> (szerk.): Experimental Methods in Heavy Ion Physics	511
<i>I. A. Sellin</i> (szerk.): Structure and Collisions of Ions and Atoms	512
<i>H. Dachs</i> (ed.): Neutron Diffraction	512
<i>G. Alefeld and J. Völkl</i> (ed.): Hydrogen in Metals	513
<i>P. Hautajärvi</i> (szerk.): Positrons in Solids	514

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója

79-2979 — Szegedi Nyomda — Felelős vezető: Dobó József igazgató

Technikai szerkesztő: Turchányi György — Műszaki szerkesztő: Marton Andor  
A kézirat nyomdába érkezett: 1978. IX. 20. — Terjedelem 9,1 (A/5) iv



307.226

145

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

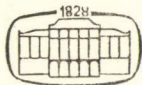
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR  
ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
PÁL LÉNÁRD

XXVII. KÖTET

6. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1979

9

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10-10 dolgozat megjelenése után a folyóirattípusokról leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattípusból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetemi tanár  
Biofizikai Intézet

1444 Budapest VIII. Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 72 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölnék. Ha részletezésre szűkség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# FIZIKAI-KÉMIAI VIZSGÁLATOK ELEKTROMOSAN VEZETŐ DONOR—AKCEPTOR SÓKON\*

KAMARÁS KATALIN

MTA, KFKI, Szilárdtestkutató Intézet

## TARTALOMJEGYZÉK

Bevezetés .....	516
1. Előzmények, irodalmi összefoglalás .....	
1.1. Definíciók, elnevezések .....	518
1.2. Elektromosan vezető szerves anyagok .....	519
1.3. Fizikai-kémiai vizsgálatok szerves donor—akceptor rendszereken .....	523
1.3.1. Oldatspektroszkópiai vizsgálatok .....	523
1.3.2. Elektronspektrumok szilárd fázisban .....	525
1.3.3. Rezgési spektroszkópia .....	528
1.3.4. Kristályenergia-számolások .....	530
1.4. A tetratiotetracén és sói .....	532
2. Kísérleti metodika és számítási módszerek .....	
2.1. A vegyületek előállítása és analízise, kristályszerkezet-meghatározás .....	534
2.2. Spektroszkópiai vizsgálatok .....	535
2.2.1. Oldatspektrumok .....	535
2.2.2. Diffúz reflexiós spektrumok .....	535
2.2.3. Infravörös spektrumok .....	536
2.2.4. Transzmissziós mérések a közeli infravörös tartományban .....	536
2.3. Madelung-energia számítások .....	537
3. Eredmények .....	
3.1. Előállítás, összetétel, a különböző szilárd fázisok összetétel-tartományának meghatározása .....	540
3.2. A TTT-jód rendszerek röntgendiffrakciós vizsgálata .....	543
3.3. Oldatspektrumok .....	543
3.4. Elektrongerjesztési spektrumok szilárd fázisban .....	548
3.5. Rezgési spektrumok .....	551
3.6. Kristályenergia-számolások .....	553
3.7. Elektromos vezetőképesség .....	556
3.8. Kiegészítő mérések TCNQ-sókon .....	557
4. Az eredmények értékelése .....	
4.1. 1:1 sók .....	561
4.2. Kevert vegyértékállapotú rendszerek .....	562
5. Szerves vezető rendszerek kémiai szerkezetére tehető összefoglaló megállapítások .....	
Függelék .....	
A Madelung-energia számítására alkalmazott numerikus eljárás paramétereinek meghatározása .....	565
A disszertációban ismertetett új eredmények .....	568
Köszönetnyilvánítás .....	569
Irodalom .....	569
Publikációk .....	571

\* Érkezett 1978. okt. 3. Egyetemi doktori értekezés.



## BEVEZETÉS

Az elektromos ellenállásmérést szerves anyagok kutatásában először molekula-kristályokon alkalmazták. A vizsgálatoknak ekkor az volt a célja, hogy a vezetőképességből és az aktiválási energiából felvilágosítást nyerjenek a kristály elektron-szerkezetére vonatkozóan, amelyet előzőleg — elsősorban optikai módszerekkel — már részletesen vizsgáltak [1]. A molekula-kristályok természetesen szigetelők voltak, kis vezetőképességgel, és több eV aktiválási energiával. Gyök—ion sók (pl. a Würster-sók) ugyan már régen ismertek voltak, ezek elektromos tulajdonságait azonban az elmúlt évtizedig alig vizsgálták.

A molekulakomplexek kémiájának fejlődése során [2, 3] sikerült egyre több új elektrondonort, illetve -akceptort előállítani, az ezek kombinációjával létrehozott kristályok között pedig találtak olyanokat, amelyek vezetőképessége esetenként 5—10 nagyságrenddel nagyobb a komponensekénél, és bizonyos hőmérséklettartományban határozottan fémes jelleget mutat. A másik szokatlan tulajdonság az igen erős vezetési anizotrópia, a fent említett nagy vezetőképesség ugyanis csak egy kitüntetett irányban jelentkezik. Mindez a szilárdtestfizika oldaláról vetette fel a részletes fizikai-kémiai vizsgálatok igényét.

A jelenlegi helyzetre az a jellemző, hogy az anyagok előállítása és összes tulajdonságának mérése szinte egyidőben történik, ezért mind a fizikai, mind a kémiai oldal feltételezi és egyben elősegíti a másik fejlődését. A közös cél a kémiai szerkezet és a vezetési tulajdonságok összefüggésének tisztázása, ami az elektromos tulajdonságok esetleges későbbi gyakorlati felhasználása szempontjából sem lenne közömbös, hiszen így megfelelően módosítható elektromos sajátságokkal rendelkező anyagokat lehetne előállítani.

A disszertáció egy ilyen anyagcsalád — a tetratietetracént (1. ábra) mint donort, és halogén-, illetve pszeudohalogénakceptorokat tartalmazó gyök—ion jellegű sók — esetében a következő kérdésekre keres választ:

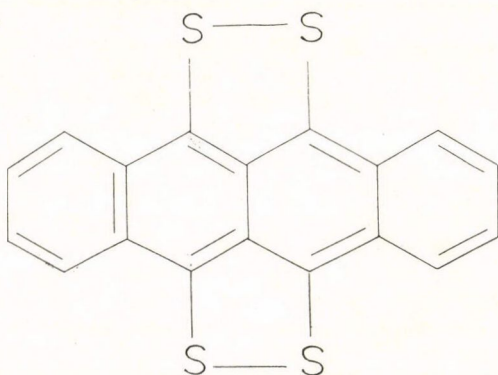
Milyen a molekulák állapota ezekben a kristályokban, rendelkezhető-e hozzájuk egyértelmű oxidációfok? Különálló ionokból, donor—akceptor párokból felépített rendszereknek kell őket tekintenünk, vagy teljesen delokalizált elektronrendszerrel rendelkező „fémeknek”?

A választ kétféle módon keres-  
tük:

a) kísérleti úton, az izolált molekula és a szilárd anyag elektrongerjesztési, illetve rezgési spektrumának összehasonlításával;

b) számítással: ionos jellegűnek tekintve a kristályt, meghatároztuk a Madelung-energiát a konfiguráció függvényében, és az eredményt összevetettük a röntgendiffrakciós kísérletekkel.

A tetratietetracén alapú vegyületek közül csak a jódot tartalmazó különböző fázisok vezetőképességéről vannak ismereteink; ezek kiug-



1. ábra. Naftacéno [5,6-cd:11,12-c'd']-bisz[1,2]ditiol  
(Tetratietetracén: TTT)



róan jó vezetők. Ahhoz azonban, hogy kémiai szempontból ezekről bármit is mondani tudjunk, szükséges volt a donor több komplexét is megvizsgálni, olyanokat, amelyekben a molekulák állapota egyértelműen jellemezhető. Bizonyos ismereteket kellett gyűjtenünk az izolált alapmolekuláról és a gyök—ionról is.

A spektroszkópai vizsgálatokat az összes vegyületen elvégeztük, a tárgyalásban mégis a legnagyobb súlyt a jódtartalmú rendszerek, ezen belül is a  $\text{TTT}_2\text{I}_{3+x}$  kapja, amelyen a legszélesebb körű szilárdtestfizikai vizsgálatok történtek, és amely kémiai szerkezetét tekintve sem szokványos.

Röntgendiffrakciós vizsgálatokat csak a  $\text{TTT}_2\text{I}_3$ -on és ennek általunk előállított „ötvezetén”, a  $\text{TTT}_2\text{I}_x\text{Br}_{3-x}$ -en végeztünk. Részletes szerkezetvizsgálatra ugyanis a Guinier-porfelvételek nem adnak módot, ezért csak azokat az anyagokat érdemes vizsgálni, amelyek szerkezete — vagy velük feltehetően izomorf szerkezet — az irodalomból ismert. Ugyanezen okból csak a pontosan meghatározott kristályszerkezetű  $\text{TTT}_2\text{I}_3$ -ra végeztünk kristályenergia-számolásokat.

Nem célja a dolgozatnak a vezetési mechanizmusra vonatkozó fizikai elméletek összehasonlítása vagy akár ismertetése, mivel ennek kellő mélységű tárgyalása nagyobb terjedelmet és lényegesen alaposabb szilárdtestfizikai felkészültséget igényelne. Ezzel a kérdéssel *Mihály György* — szintén a KFKI Szerves Szilárdtestek Laboratóriumában készült — doktori disszertációja foglalkozik [4]. Ebből a munkából származnak a vezetőképességi görbék, amelyeket csak arra használunk fel, hogy a kémiai jellegű változások vezetőképességre gyakorolt hatását lemérjük.

Erre a célra a TTT-sók vizsgálata — a kevés vezetőképességi adat miatt — nem volt elegendő, ezért kiegészítésül néhány ismert vezetőképességű tetracián-kinodimetán són is végeztünk optikai méréseket. Ezeknek ismertetése azért is szükséges, mert a spektrumok értelmezésében az eddigi irodalomhoz képest új alternatívát vet fel, amelynek jogosságát éppen a TTT-anyagsaládon kívántuk ellenőrizni.

A disszertáció első fejezetében — a nomenklátúra néhány pontjának rögzítése után — először áttekintjük a szerves vezető anyagok olyan tulajdonságait, amelyek közvetve vagy közvetlenül, szerepet játszanak az elektromos vezetésben. Ezután az irodalomban közölt fizikai-kémiai vizsgálatok eredményeivel foglalkozunk, különös tekintettel a jól vezető anyagokra és azokra a módszerekre, amelyeket mi is használtunk. Példaként legtöbbször a tetracián-kinodimetán akceptort tartalmazó rendszerekre hivatkozunk. Ezek alkotják az eddig vizsgált vezető anyagok döntő többségét, ezeken történt a legtöbb mérés, többek között a KFKI-ban is, és mint látni fogjuk, a TTT-sók viselkedése és a TCNQ-sók között nagyon sok az analógia.

A második fejezetben a kísérleti, illetve számítási módszereket ismertetjük. Itt a többihez képest két téma, a diffúz reflexiós spektroszkópia és a Madelung-energia-számítás, terjedelmi túlsúlyban van. Az ok az előbbi esetében az, hogy a módszer más spektroszkópai eljárásokhoz viszonyítva kevésbé ismert, ezért kissé részletesebb leírás látszott szükségesnek. Az utóbbi esetben pedig már az optimális paraméterek megválasztása is saját munka volt, ilyen vizsgálatot tudomásunk szerint más nem végzett. (A paraméter-meghatározás részleteit a Függelékben közöljük.)

A harmadik fejezet a kísérleti és számítási eredményeket tartalmazza.

A negyedik fejezetben az eredmények alapján levonható következtetéseket írtuk le az anyagok kémiai szerkezetére vonatkozóan.

A disszertáció végén összefoglaltuk a főbb következtetéseket, és itt próbálunk választ adni a Bevezetésben feltett kérdésekre is.



# 1. ELŐZMÉNYEK, IRODALMI ÖSSZEFOGLALÁS

## 1.1. Definíciók, elnevezések

A dolgozatban tárgyalt anyagok nómenklatúrája, sőt még kémiai besorolásuk sem egyértelmű. Ez egyrészt a terület újdonságával, másrészt határterületi jellegével magyarázható. Az alábbiakban leírt elnevezéseket az egész disszertációban az itt ismertetett értelemben használjuk, azzal a megjegyzéssel, hogy ez nem mindenütt egyezik a vonatkozó irodalom szóhasználatával, nem is feltétlenül az egyértelműen helyes megoldás, de ezen a téren a nevezéktan rendezése még várat magára.

*Molekulakomplexnek* nevezzük első közelítésben az önmagukban is stabil molekulákból álló olyan képződményeket, amelyeket a van der Waals-erőknél erősebb kölcsönhatás, de nem szigorúan vett kémiai (kovalens vagy datív) kötés köt össze. A kötés létrejötte mindig legalább részleges elektronátadást foglal magában, az elektront szolgáltató komponenst *donornak* (*D*), az elektront felvevőt *akceptor*nak (*A*) nevezzük. A rendszer hullámfüggvényét *Mulliken* [5] szerint a következő alakban írhatjuk:

$$\Psi_{DA} = a\Psi_{D,A} + b\Psi_{D^+A^-},$$

ahol *D*, *A* azt az állapotot jelenti, amelyben a két molekula között kölcsönhatás nincs,  $D^+A^-$  pedig a teljes töltésátadással létrejött állapotot.

Az *a* és *b* együtthatók nagyságától függően esik a rendszer állapota közel a semleges molekulákéhoz, illetve az ionpáréhoz. Két határesetet különböztetünk meg: az  $a \gg b$  esetben *gyenge komplexről*, a  $b \gg a$  esetben *erős komplexről* beszélünk. (Tekintetbe véve a két együtthatóra teljesülő normálási feltételt:

$$a^2 + b^2 + 2abS_{01} = 1$$

$$S_{01} = \int \Psi_{DA} \Psi_{D^+A^-} dv$$

*a* = 1, illetve *b* = 1 a két szélső állapotot jelenti.)

Ez a tárgyalásmód oldatban kialakuló komplexekre teljességgel megfelel, azonban problémák merülnek fel akkor, ha egy ilyen rendszer kristályokat képez. A szilárd fázisban már nemcsak a sztöchiometriának megfelelő számú molekula hat kölcsön, hanem egy molekula a környező összes szomszéd hatását érzi, azonos és ellentétes töltésűekét egyaránt. A kristály energiájának minimuma nem feltétlenül annál a töltéseloszlásnál van, ahol a donor—akceptor páré (hiszen a kristály hullámfüggvénye az összes őt alkotó molekuláéból tevődik össze, és csak akkor tekinthető független  $\Psi_{DA}$  tagok összegének, ha a donor—akceptor kölcsönhatás a domináns).

Az irodalomban ezekre a képződményekre a leggyakrabban használt kifejezések: molekulakomplex, donor—akceptor komplex, töltésátviteli komplex, töltésátviteli só. Szilárd halmazállapotban az itt leírt rendszerek mindegyike tartalmaz molekulaionokat, ilyen értelemben tehát a „só” elnevezés indokolt. Ugyanakkor a „gyök—ion só” nem teljesen helytálló, mert gyök—ionok mellett gyakran fordulnak elő semleges molekulák is a kristályban. Ezért a szilárd vegyületekre a *donor—akceptor só*, illetve *töltésátviteli só* kifejezést fogjuk használni; ezek határesetként tartalmazzák a teljes töltésátvitellel képződött, csak ionokból álló kristályokat is; a *gyök—ion só* megjelölés ugyanakkor csak az utóbbiakra vonatkozik. A *molekula-*



komplex és donor—akceptor komplex elnevezést fenntartjuk az oldatban képződő rendszerek számára.

A dolgozatban többször lesz szó molekulák „vegértékállapotáról”, illetve „oxidációs állapotáról”. Ezen — az atomok és atomionok oxidációfokához hasonlóan — a molekula, illetve molekulaion össztöltését értjük. Tört értékek esetében az „oxidációfok” a megfelelő töltéshordozó megtalálási valószínűségét adja meg az adott molekulán. (Az ilyen értékek használata megengedhető lehet akkor, ha egy kristályt semleges molekulák és molekulaionok vegyesen alkotnak, és a molekulák kristallográfiailag mégis ekvivalensek, mint ez a valóságban elő is fordul.)

## 1.2. Elektromosan vezető szerves anyagok

Elektromosan vezető szerves donor—akceptor vegyületeket először Akamatu és Inokuchi állított elő 1954-ben [6], aromás szénhidrogének és halogének szilárdgáz reakciójával. Az anyagok vezetőképessége elérte a szervesetlen félvezetőkét (2. ábra), a vezetőképesség hőmérsékletfüggése pedig tipikus félvezető sajátosságokat mutatott:

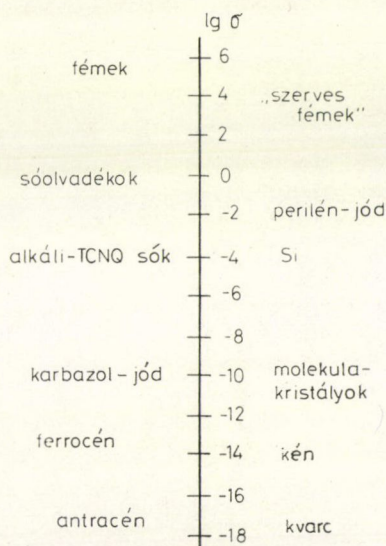
$$\sigma = \sigma_0 \exp(-\Delta E/kT) \quad (1.1.)$$

néhány tized eV-os  $\Delta E$  aktiválási energiával. Az anyagok halogéntartalma tág határok között változtatható, bennük a kölcsönhatás igen gyenge, a halogéntartalom levegőn való tároláskor csökken.

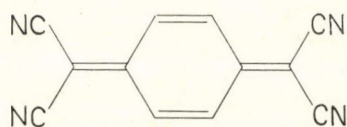
A stabilitás növelése és az egyértelműbb összetétel elérése céljából új, erősebb akceptorok alkalmazása látszott célszerűnek. Melby és munkatársai 1960-ban állították elő a tetracián-kinodimetánt [7] (3. ábra). A TCNQ már szigorú 1:1 vagy 1:2 összetételű sókat alkotott szerves donorokkal, több esetben  $100 (\Omega\text{cm})^{-1}$  nagyságrendű vezetőképességgel. Különösen jó vezetőnek bizonyult az 1973-ban előállított tetrafulvalén (TTF) só (4. ábra) [8].

A tetratiófulvalén egyszerűbb akceptorokkal is — halogénnel, pszeudohalogénnel — jól vezető anyagokat képez [9]. Mivel ezekben az esetekben az akceptor változása kevésbé változtatja meg a szerkezetet, mint a TCNQ-sókban a donorcseré, nagyobb a lehetőség a szisztematikus vizsgálatokra. Ezért újabban egyre többet foglalkoznak szerves donor — halogén-akceptor-rendszerekkel — a donorok kéntartalmúak: TTF, tetratiótetracén (TTT, 1. ábra), illetve porfinszármazékok [10]. Akceptorként elsősorban jód és bróm szerepel.

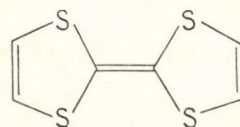
Az eddig ismert donor—akceptor sók vezetőképessége és kémiai szerkezete igen nehezen hozható egyértelmű kapcsolatba. Az egyszerű félvezető-modell számos anyagra nem alkalmazható, mivel azok bonyolultabb hőmérsékletfüggést mutatnak. Szobahőmérséklet felett a vezetés fémes jellegű, majd egy maximumot



2. ábra. Különböző anyagok vezetőképessége szobahőmérsékleten



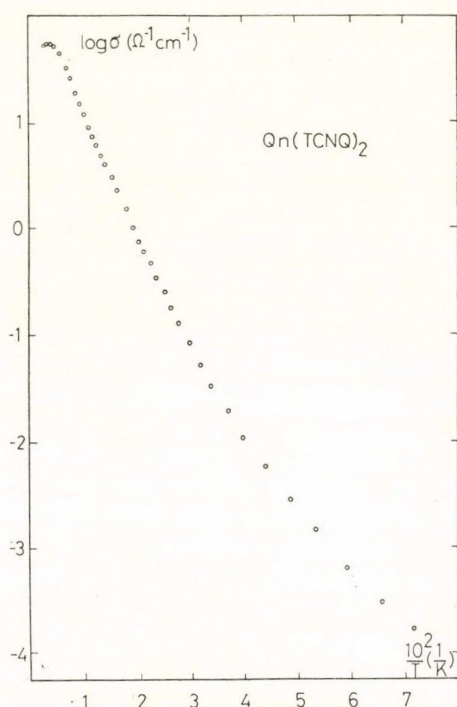
3. ábra. 1,4 bisz(propándinitril)-2,5 ciklohexadién-1,4 diilidén (tetracián-kinodimetán: TCNQ)



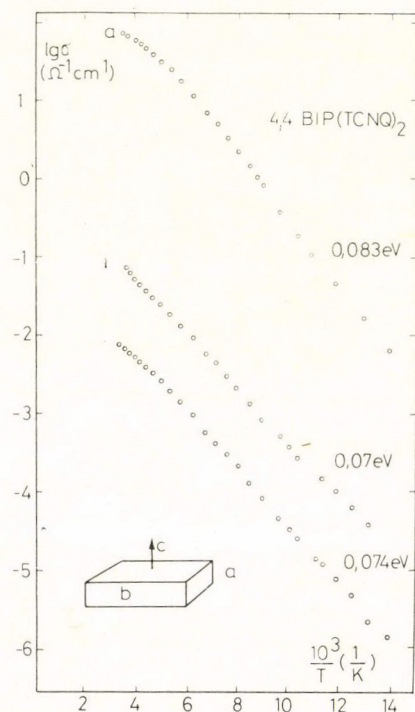
4. ábra. Bisz[1,3]-ditiol (tetratiofulvalén: TTF)

elérve a hőmérséklet csökkenésével csökkenni kezd, azonban itt sem jellemezhető egy egyszerű exponenciális viselkedéssel (5. ábra).

A vezetőképességek összehasonlítása sem problémamentes. Ahol ugyanis, a kristályok kis mérete miatt, egykristály-vezetőképesség nem mérhető, préselt pasztillák ellenállását mérik. Ez az eljárás az aktiválási energiára helyes értéket szolgáltat (mivel az, meglepő módon, irányfüggetlen), a vezetőképesség abszolút értékére ugyanakkor — mivel a kristályok vezetőképessége rendkívül anizotróp — mintegy 2 nagyságrenddel kisebb értéket ad. Emiatt az alábbiakban a szénhidrogén-halogén vegyületeket ki is hagyjuk a tárgyalásból, mert ezekre egykristály-mérések nem ismeretek, továbbá kristályszerkezetük is bizonytalan.



5. ábra. A kinolinium  $(TCNQ)_2$  vezetőképességének hőmérsékletfüggése. Mihály György mérése



6. ábra. A 4,4'-bipiridilium  $(TCNQ)_4$  vezetőképességének hőmérsékletfüggése különböző irányokban. Mihály György mérése [11]



A többi vizsgált rendszeren történt széles körű kutatások alapján két kritériumot biztosan meghatározhatunk, aminek a fémes jellegű vezetés létrehozásában feltétlen szerepe van [12]: az egyik a kristályszerkezet, a másik az ún. kevert vegyérték-állapot („mixed valence state”).

A jól vezető anyagok kristályszerkezete igen jellemző és különleges: külön-külön elhelyezkedő donor-, illetve akceptorláncokból állnak, a molekulák síkja a lánc-irányra merőleges. Ez több nagyságrendnyi vezetőképesség-növekedést eredményez azokhoz a vegyületekhez képest, amelyekben a donor- és akceptormolekulák a lánc mentén egymást váltogatva helyezkednek el.

Ez a szerkezet okozza a jelentős vezetőképességi anizotrópiát: a láncok mentén a legnagyobb a vezetőképesség, a másik két irányban 1—2 nagyságrenddel kisebb. Példaként a 4,4'-bipiridilium (TCNQ)<sub>4</sub> vezetőképességének hőmérsékletfüggése látható a 6. ábrán, három irányban [11]. A vezetés mechanizmusa tehát a legdurvább közelítésben úgy képzelhető el, hogy a donor által az akceptornak átadott elektronok (vagy donorlánc-vezetés esetén a donorláncban maradó lyukak) a lánc mentén delokalizálódnak. A vezető láncban elhelyezkedő molekulában új aromás gyűrű alakul ki [12] az elektronfelvétel, illetve -leadás hatására; a  $\pi$ -pályák átfedése biztosítja a delokalizáció lehetőségét. Ennek megfelelően a láncokon belül az aromás molekulák távolsága anomálisan rövid ( $\sim 3,2$  Å).

Az egyes molekulák elhelyezkedésében a lánc mentén ugyanakkor már vannak különbségek, amelyek a vezetőképességét is jelentősen befolyásolják. Ha az átfedés csak két-három molekulára terjed ki, dimer- vagy ún. „sziget”-szerkezet keletkezik [13]. Itt az elektronok néhány molekulán delokalizáltak, az egyes „szigetek” között gyengébb a kötés, ezek a szakaszok a vezetés szempontjából potenciálgátként működnek. Olyan esetekben, ahol a molekulák az egész vezető láncban ekvidisztánsan, egymáshoz közel helyezkednek el, ilyen potenciálgát nem lép fel, a teljes delokalizáció nem akadályozott (1. táblázat).

## I. TÁBLÁZAT

Ekvidisztáns és alternáló láncokból álló TCNQ-sók vezetőképessége és a molekulatávolságok a lánc mentén

	$D(\text{Å})$	$\sigma_{RT} (\Omega^{-1} \text{ cm}^{-1})$
Kinolinium (TCNQ) <sub>2</sub>	3,22	60
Akridinium (TCNQ) <sub>2</sub>	3,25	80
Trietilammónium (TCNQ) <sub>2</sub>	3,24	
	3,31	4
Metil-trifenil-foszfónium (TCNQ) <sub>2</sub>	3,25	
	3,32	2

Delokalizáció azonban még azokban az esetekben sem lép fel szükségszerűen, ahol erre a szerkezeti feltételek adottak. Abban az esetben ugyanis, ha minden rácsponton azonos számú töltéshordozó foglal helyet, azaz minden molekula azonos vegyértékállapotban van, a szomszéd rácspontra történő töltésátvitel feltétlenül magasabb energiájú állapotot eredményez. Ha ellenben a két vegyértékállapot különböző (ezt hívjuk kevert vegyértékállapotnak), egyszerű elektronsere következik be,



ami csak minimális energiát igényel a polarizációs hatások, illetve a többi töltéstől származó megváltozott Coulomb-energia kompenzálására [14].

A kevert vegyértékállapot többféleképpen érhető el, a lényeg mindig az, hogy a lánc több molekulát tartalmaz, mint ahány töltést a komplementer lánc átad. Ez legtöbbször úgy valósul meg, hogy a molekulák száma nem azonos a két láncban. A TCNQ esetén az ún. komplex sókban ( $D(\text{TCNQ})_2$  vagy  $D_2(\text{TCNQ})_3$ ) a donor egységnyi töltésű, az akceptorláncban pedig formálisan töltött és semleges TCNQ molekulák egyaránt megtalálhatók. Ezeknek az anyagoknak valóban magasabb a vezetőképességük, mint a megfelelő egyszerű sóké (2. táblázat). A halogéntartalmú anyagoknál, például a kálium-tetracianoplatinát(KCP)-bróm [15], a TTF-jód vagy a TTT-jód rendszerben, előfordul nemsztöchiometrikus arány is.

## II. TÁBLÁZAT

Egyszerű és komplex TCNQ-sók vezetőképessége  
(a: porminta-mérések, b: egykristály-mérések)

	$\sigma_{RT}$	
	1:1	1:2
N-metilkinolinium <sup>a</sup>	$10^{-7}$	0,5
Trifenilmetil-foszfónium <sup>b</sup>	$2 \cdot 10^{-11}$	0,02
Trietilammónium <sup>a</sup>	$10^{-9}$	4,
4-ciano-N-metilkinolinium <sup>a</sup>	$7 \cdot 10^{-6}$	0,02

Léteznek jól vezető 1:1 összetételű sók is, a két legismertebb a már említett TTF—TCNQ és az N-metilfenaziniumsó (NMP—TCNQ). Ezekben — fotoelektron-spektroszkópiái, IR, röntgen stb. adatok alapján [16] — jelentős mennyiségű semleges donor, illetve akceptor jelenlétét lehetett kimutatni. Itt tehát mind a donoroknak, mind az akceptoroknak csak egy része van ionizálva, és ezáltal mindkét láncban kevert vegyértékállapot alakul ki. Ezekben az anyagokban így lehetőség nyílik a kétláncú vezetésre. A TTF-halogének jó vezetőképessége is arra mutat, hogy a TTF-lánc lyukvezetésre képes.

A semleges molekulák beépülése a kristályba, valamint a részleges töltésátvitel kialakulása — oldatban ionpárt alkotó rendszerekben — elektrosztatikus okokkal magyarázható. A láncban belüli taszítás csökkentése céljából elektronvissaadás történik az akceptorról a donorra, mindaddig, amíg az így nyert energiacsökkenés nagyobb, mint a láncok közötti vonzás csökkenése miatti energianövekedés.

A láncokat tartalmazó szerves gyök—ion sók elektronszerkezetének pontos leírása számos problémát vet fel. Szilárd testek elektronpályáit ugyanis általában két határesetben szokták számolni: delokalizált elektronok által alkotott energiasávok segítségével (fémek jellegű vegyületek) vagy lokalizált atomi pályákkal (ionkristályok). Az egydimenziós jelleg itt azt jelenti, hogy Bloch-függvényekkel leírható energiasávrendszer kialakulásának csak a láncok irányában van meg a lehetősége, az arra merőleges irányokban a viselkedés ionkristály-jellegű. A legfelső betöltött energiasávban levő töltéshordozók száma szabja meg, hogy fémről vagy félvezetőről beszélünk: fémeknél a vegyértéksáv csak részlegesen betöltött, félvezetőkben a teljesen betöltött vegyértéksávtól keskeny tiltott sáv választja el a legalacsonyabb



üres, ún. vezetési sávot. Ennek megfelelően, félvezetőkben a vezetési sávban a töltéshordozók száma változik a hőmérséklettel, így kapjuk az (1.1) egyenletben felírt aktivációs viselkedést. Fémekben a töltéshordozók száma nem változik a hőmérséklettel, a vezetőképesség az elektron—elektron és elektron—rács kölcsönhatások hőmérsékletfüggését tükrözi.

A szerves vezető anyagokban a vegyértéksáv betöltöttsége, ha ekvidisztáns láncokat feltételezünk,  $\frac{1}{2q}$ , ahol  $q$  a töltésvitel mértéke (hiszen teljesen betöltött sáv  $2N$  elektronpályát tartalmaz, ahol  $N$  az atomok, illetve molekulák száma a kristályban). Eszerint még az 1:1 sók is fémes jelleggel kellene, hogy rendelkezzenek. A kristályon belüli különféle tényezők azonban (rácsstorzulás a vezető- vagy a komplementer lánc, donor—akceptor kölcsönhatás, elektron—elektron taszítás, rendezetlenség) sávfelhasadást és így félvezető állapot kialakulását okozhatják. A piridin-benzolójainak komplex TCNQ-sói esetében *Grüner György és munkatársai* [17] mutatták ki, hogy a donorok dipólmomentuma által okozott donor—akceptor kölcsönhatás erősségétől függően lesznek félvezető vagy fémes jellegűek. A vezetési sáv szélessége, ami a töltéshordozók delokalizáltságának mértékére jellemző, mindenesetre lényegesen kisebb, mint a normál fémeknél (néhány tized eV a fémek  $\sim 10$  eV-os sávszélességével szemben). Ezzel magyarázható, hogy a vezetőképesség kis külső perturbációkra is igen érzékeny, ami a szabatos leírást nagymértékben bonyolítja.

Nyilvánvaló, hogy a donor és az akceptor kémiai tulajdonságai, illetve a köztük fellépő kölcsönhatások határozzák meg a szokatlan kristályszerkezetet és így közvetve a transzporttulajdonságokat is. Ezek kapcsolatáról azonban ma még nagyon keveset tudunk. Annyi bizonyos, hogy a kialakuláskor nemcsak a donor—akceptor, hanem az azonos molekulák közti olyan kölcsönhatásokat is figyelembe kell venni, amilyen például a szerves gyök—ionok dimerizálódásra való hajlama [18] vagy a polihalogenidképződés.

A donor és akceptor között oldatban kialakuló kölcsönhatás erőssége tehát lényeges, de nem egyedül meghatározó a kialakuló vegyület makroszkopikus tulajdonságai szempontjából. Emiatt, az oldatban történő vizsgálatok mellett, olyan jellegű szilárdtestkémiai mérésekre is szükség van, amelyekkel a kristályos környezet hatását mérhetjük le a molekulán.

A következő fejezetekben azokról a módszerekről lesz szó, amelyek segítségével a molekulák állapota izolált vagy legfeljebb szolvatált formában, illetve a kristályrácsban tanulmányozható, különös tekintettel azokra az eredményekre, amelyek a donor—akceptor sók vizsgálatában születtek.

### 1.3. Fizikai-kémiai vizsgálatok szerves donor—akceptor rendszereken

#### 1.3.1. Oldatspektroszkópiai vizsgálatok

Az oldatspektrumok vizsgálata a molekulavegyületek kutatásában kezdettől fontos szerepet játszott. A terület kialakulásának kezdetét éppen egy oldatspektroszkópiai közlemény jelentette: *Benesi és Hildebrand* [19] több szerves oldószer-jód rendszerben egy olyan elnyelési sávot talált, amely sem a jódra, sem az oldószerre nem volt jellemző. Ennek a jelenségnek a magyarázatát adta *Mulliken* híres munkájában [5], amelyben megalapozta a donor—akceptor-rendszerek elméletét.



Tekintsünk egy donor—akceptor rendszert, melynek hullámfüggvénye:

$$\Psi_{DA} = a\Psi_{D,A} + b\Psi_{D^+A^-}.$$

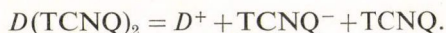
A már említett két határesetben (gyenge, illetve erős komplex) az optikai átmenetek a következőképpen alakulnak:

Ha  $a \gg b$ , azaz az alapállapot a semleges molekulákéhoz van közel, megkapjuk mindkét molekula elnyeléseit, esetleg — a donor—akceptor kölcsönhatás perturbáló hatása miatt — némi eltolódással. Ugyanakkor egy új átmenet lehetősége adódik: a donor legmagasabb betöltött pályájáról egy elektron gerjeszthető az akceptor legalacsonyabb energiájú üres pályájára. Ezt az átmenetet nevezzük töltésátviteli („charge-transfer”) sávnak. A töltésátviteli sáv helyéből, kémiaiilag hasonló donorok vagy akceptorok sorozatának vizsgálatával, hasznos következtetések vonhatók le, elsősorban az ionizációs potenciál-, illetve elektronaffinitás-értékek becslhetők [20].

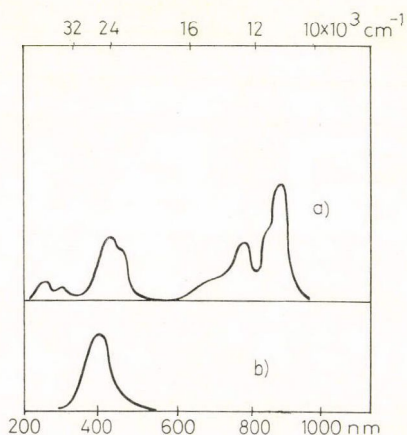
A másik szélső esetben, ha  $b \gg a$ , már az alapállapotban megtörtént a töltésátadás. Ilyenkor csak a molekulaionokra jellemző spektrumot kapjuk, sem a semleges molekulák elnyelési sávjai, sem a töltésátviteli sáv nem látható.

Az optikai spektrum tehát közvetlen felvilágosítást ad a komplexek erősségéről. Megjegyzendő, hogy ez az oldószertől is függ [21]. Ha az oldószert csak adott dielektrikus állandójú, iners közegnek tekintjük, tehát kizárunk minden kompetitív reakciót a komponensek bármelyikével, akkor azt mondhatjuk, hogy apoláros oldószer a gyenge komplex kialakulásának, poláros oldószer az ionpárképződésnek és az ezt követő disszociációnak kedvez. Ismeretesek olyan donor—akceptor rendszerek, amelyek, ennek megfelelően, csak apoláros oldószerben mutatnak töltésátviteli sávot [21]. Ez a jelenség azonban csak akkor lép fel, ha a rendszer energiája a töltésátviteltől csak kismértékben függ; ellenkező esetben az optimális töltésátvitel igyekszik kialakulni, és a komplex a „hasonló hasonlót old” elv alapján tőle távolosó oldószerből azonnal kiválik. (Ezt a tényt preparatív célokra lehet előnyösen felhasználni.)

A szerves vezető anyagok vizsgálatában az oldatban felvett spektrumoknak elsősorban azonosítási, illetve összehasonlítási szerepük van. Rutinszerűen használják a TCNQ egyszerű (donor—akceptor arány 1:1) és komplex (1:2, 2:3) sóinak megkülönböztetésére, ugyanis az elemanalízis alig mutat különbséget a kétféle módosulat között. 1:1 sók acetonitriles oldatában (ha a donor a vizsgált tartományban nem gerjeszthető) csak a TCNQ<sup>-</sup> ion spektrumát kapjuk (7. ábra), komplex só esetén azonban megjelenik a TCNQ molekula 25 300 cm<sup>-1</sup> hullámszámú sávja is. A komplex sók tehát acetonitriles oldatban a következő módon disszociálnak:



Ha a donorkation a TCNQ elnyelési tartományában nem abszorbeál (zárt héjú ionoknál ez a feltétel általában teljesül), a



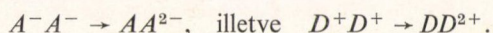
7. ábra. a) TCNQ<sup>-</sup>,  
b) TCNQ abszorpciós spektruma  
(acetonitriles oldat)



két csúcs aránya az összetételre jellemző [22]. Ezzel a vegyületek összetételének gyors analízise végezhető el.

Mivel a vezető anyagok vizsgálatában elsősorban a molekulák kristálybeli állapota érdekes, az oldatspektroszkópiát leginkább referencia-célokra, az izolált molekulafajták jellemző sávjainak megállapítására használják. A különböző oxidációfokú molekulaionok oldatszínképét ún. spektroelektrokémiai módszerrel veszik fel: kontrollált elektrolízissel ionizálják a semleges molekulákat az oldatban, és az így kapott oldatot vizsgálják spektrofotometriásan. Ezzel az ellenionok esetleges zavaró hatása, illetve a megfordítható, egyensúlyra vezető redox reakció által okozott kísérleti nehézségek szűrhetők ki [23, 24].

A redox átalakulások mellett oldatspektrumokban nyomon követhető a nyílt héjú ionokra igen jellemző dimerizálódás is. Mind a gyökionok, mind a gyök-kationok hajlamosak olyan dimerek képzésére, amelyekben a két párosítatlan elektron ellentétes spinnel létesít kötést. A dimer tömény oldatban [18] vagy alacsony hőmérsékleten [25] mutatható ki. Jellemzője egy alacsony energiájú átmenet, amely a gyenge komplexek töltésátviteli sávjával analóg, elektronátlépésnek felel meg az egyik molekuláról a másikra:



Ez az átmenet a molekulák síkjára merőlegesen polarizált, míg a molekulán belüli átmenetek a molekulasisíkokba esnek. Ezért újabban egyre nagyobb szerephez jut a molekulák orientációja nematikus folyadékkristályokban [26]. A folyadékkristályok elektromos tér hatására párhuzamos síkokat alkotva rendeződnek, ezáltal a köztük elhelyezkedő nagy planáris molekulák is egy irányba orientálódnak. A folyadékkristályos oldatot polarizált fényrel megvilágítva, szétválaszthatók a különbözően irányított átmenetek [27, 28]. Az ilyen mérések eredményei a polarizált egykristály-spektrumokkal hasonlíthatók össze, és felhasználhatók a spektrumvonalak hozzárendelésére.

### 1.3.2. Elektronspektrumok szilárd fázisban

Mivel az elektromos vezetés az egész kristály makroszkópos tulajdonsága, a fizikai-kémiai vizsgálatok jó részének is ebben a halmazállapotban kell történnie, ha kapcsolatot akarunk találni a kémiai és fizikai jellemzők között. Ezért lényegesek a szilárd fázisban felvett elektrongerjesztési spektrumok.

Kristályok elektrongerjesztéseit háromféle modell alapján szokták tárgyalni [29]:

a) Atomi vagy molekuláris modell: az átmeneteket a rácsot alkotó ionok vagy molekulák gerjesztéseiből, a kristályrács perturbáló hatását figyelembe véve, értelmezzük. Az alap- és gerjesztett állapot is lokalizált.

b) Gerjesztési hullám(exciton)-modell: a gerjesztéssel keletkezett elektron—lyuk párt nem lokalizált, hanem kiterjedt állapotként kezeljük, azaz megengedjük a gerjesztés „vándorlását” a kristályban. Ennek hatása molekulakristályok esetén főleg a molekuláris spektrumvonalak felhasadásában és eltolódásában jelentkezik, a spektrum fő vonásai az egyszerű molekuláris modellel leírhatók.

c) Fémes modell: ha az elektronrendszer lokalizált nívók helyett széles sávokkal írható le, a sávon belül az elektronok folytonosan gerjeszthetők, majd az abszorpcióban éles levágás következik be. A sáv—sáv átmenetek magasabb frekvenciákon



jelentkeznek. Normál fémek esetén a konvencionális látható/UV tartományban a folytonos abszorpciós spektrumot és az azt követő minimumot észleljük, az ún. „abszorpciós él” energiája 3—4 eV (25—30 000 cm<sup>-1</sup>).

*Slater* és *Shockley* az idézett munkában [29] a nátriumklorid ultraibolya spektrumát értelmezték, és azt találták, hogy az atomi és fémek modell kombinációja kielégítően megmagyarázza az észlelt, folytonos alaplól kiemelkedő éles vonalakkal álló spektrumot.

Szilárd anyagok optikai tulajdonságait háromféle módon vizsgálhatjuk:

a) transzmisszióval, egykristályokon, átlátszó rétegeken vagy préselt pasztillákon

b) reguláris reflexió mérésével egykristályokon vagy préselt mintákon

c) diffúz reflexióval, pormintákon.

Transzmissziós módszerrel közvetlenül az abszorpciós koefficiens mérhető, ha a fényszórás által okozott veszteségektől eltekinthetünk. Egykristályon végzett mérésnél a reguláris reflexió okozhat jelentős hibát, míg átlátszó pasztillába préselt poroknál, ahol a szemcseméret kicsi, már a diffúz reflexió játszik nagyobb szerepet. Erősen abszorbeáló anyagoknál mindkét esetben elmosódottá válnak a spektrumok és az intenzitásviszonyok kevésbé megbízhatóak. A spektrumvonalak helyét viszont egyértelműen meg lehet állapítani. Emellett a módszer gyors, és speciális műszerezettség nem igényel, ezért sorozatok összehasonlítására gyakran alkalmazzák.

Reguláris (spekuláris) reflexiós mérésnél a minta (optikailag sima) felületéről visszavert fény intenzitását regisztráljuk a beeső fénysugárhoz képest. A reflexióra a Fresnel-egyenlet érvényes:

$$R_{\text{reg}} = \frac{I_{\text{refl}}}{I_{\text{beeső}}} = \frac{(n-1)^2 + n^2 K^2}{(n+1)^2 + n^2 K^2},$$

ahol  $n$  a törésmutató,  $nK$  az abszorpciós koefficiens. Látható, hogy  $K \gg n$  esetben a reflexió 1-hez tart, azaz erősen abszorbeáló anyagok tükrözőképessége is nagy. Ilyenkor a beeső fény legnagyobb része már a felületről visszaverődik, anélkül, hogy az anyagba behatolna. Fémek optikai sajátosságait, éppen ezért, majdnem kizárólag ezzel a módszerrel vizsgálják. Ez kísérletileg is könnyen megvalósítható, mivel fémekből párologtatással igen jó minőségű felületeket lehet előállítani. Egyéb, erősen abszorbeáló anyagoknál, ahol ez nem lehetséges, a tükröző felületet préseléssel nyerik.

A fenti két módszerrel egykristályokat vizsgálva, mód van arra is, hogy polarizált fény segítségével a gerjesztések irányfüggését megállapítsuk, ami különösen anizotróp anyagokban értékes információ.

Diffúz reflexiót átlátszatlan, viszonylag kis szemcseméretű porokon tapasztalunk (a szemcseméret kicsi a megvilágító nyaláb átmérőjéhez képest). A fény egy része az anyagban elnyelődik, a többi — a felületen, majd az anyag belsejében történő többszöri szóródás után — visszajut a felületre, és ideálisan diffúz reflexió esetén izotróp módon oszlik el abban a féltérben, amely a beeső sugárnyalábot tartalmazza. A szórás mechanizmusára a Rayleigh-, illetve Mie-elmélet közvetlenül nem alkalmazható, mivel a részecskék távolsága nem elég nagy ahhoz, hogy azokat független szórócentrumoknak lehessen tekinteni (ún. „többszörös szórás” jelensége).

Ha a minta rétegvastagsága olyan, hogy transzmisszió már nincs („végtelen rétegvastagság”), szemcsemérete pedig néhány  $\mu$ -nál nem nagyobb, akkor érvényes



a Kubelka és Munk által levezetett összefüggés:

$$F(R_D) = \frac{(1 - R_\infty)^2}{2R_\infty} = \frac{K}{S},$$

ahol  $R_\infty$  a végtelen rétegvastagságú minta által diffúzan reflektált és a beeső fény intenzitásának hányadosa.  $K$  az anyag abszorpció,  $S$  pedig a Mie-elméletben használt szórási koeficiens.  $S$ -t hullámhosszfüggetlennek tekintve (a szemcseméret megválasztásával ez elérhető) a diffúz reflexió spektruskópiával tehát végső soron az abszorpció koeficiens hullámhosszfüggését határozhatjuk meg. Abszolút (moláris) értéket ugyan így sem tudunk mérni, hiszen csak végtelen optikai úthosszal dolgozhatunk, a spektrumvonalak egymáshoz viszonyított intenzitását azonban — a kísérleti körülmények szigorú betartásával — torzításmentesen kapjuk meg.

A szerves töltésátviteli sók vizsgálata szempontjából az ideális módszer feltétlenül a polarizált fényben mért egykristály-abszorpció vagy reguláris reflexió lenne, itt azonban nagyon sok kísérleti nehézség lép fel. A vegyületek fizikai-kémiai tulajdonságaira ugyanakkor a polikristályos mintákon kapott eredményekből is értékes következtetések vonhatók le.

Matsunaga és Iida [30—33] számos szerves vezető anyag diffúz reflexió spektrumával foglalkozott. A spektrumok nagy vonalakban molekulaszpektrum jellegűek. Minden vizsgált esetben megtalálhatók az alapvegyület ionos állapotának jellemző elnyelései, akár oldatban, cserebomlással készült az anyag (TCNQ-sók), akár szilárd fázisú reakcióval (fenotiazin-jód rendszerek). A TCNQ-sóknál megjelennek a  $(\text{TCNQ}^-)_2$  dimer sávjai is. Egyszerű fémsókban csak a dimerspektrumot látjuk, ez megfelel a kristályszerkezetnek is: a lánc mentén  $\text{TCNQ}^-$  ionpárok helyezkednek el, a távolság a párokon belül kisebb, a párok között nagyobb a van der Waals-sugarak összegénél. A komplex sók spektruma a semleges molekula, a molekulaion és a dimer spektrumának szuperpozíciója, az egyes komponensek aránya azonban anyagonként változó. A félvezető jelleget mutató, rosszabb vezetőképeségű vegyületekben a dimer-csúcs sokkal kifejezettebb, intenzívebb, mint a jól vezető, fémes jellegű sókban.

Minden komplex sóban, az infravörös tartományban ( $2000\text{—}5000\text{ cm}^{-1}$  között) megjelenik egy széles, erős csúcs, amely egyik komponens spektrumában sem szerepel. Ezt Iida intermolekuláris átmenetnek tulajdonította, amely a következő folyamatnak felel meg:



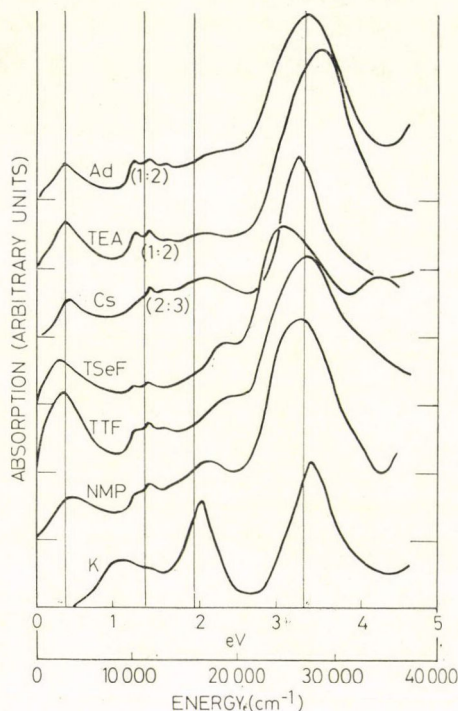
Ez az átmenet gázfázisban csak a konfigurációváltozással járó energiát igényelné, a megváltozott Coulomb- és polarizációs viszonyok miatt azonban a végállapot néhány tized elektronvolttal magasabb energiájú. Itt tehát tulajdonképpen egy azonos molekulafajták közti töltésátvitelről van szó. A feltevést megerősítették Kuroda és munkatársai polarizált egykristály-abszorpció mérései a kinolinium-TCNQ-n [34], amelyek szerint a kisenergiájú átmenet a láncirányra merőlegesen polarizált.

Torrance, Scott és Kaufman [14] több TCNQ vegyület abszorpció spektrumát mérte káliumbromid pasztillában. A jól vezető 1:1 sók (TTF—TCNQ, N-metil-fenazinium-TCNQ) spektrumát egyezőnek találták a komplex sókéval. Ezekben a vegyületekben ugyanis a töltésátvitel nem teljes, tehát az akceptorlánc hasonló



a komplex sókéhoz, semleges molekulák és ionok váltakoznak benne. Ennek megfelelően megjelenik az infravörösben is az intermolekuláris elektronátmenet (8. ábra).

A reflexiós spektrumokat illetően az egy dimenziós fémes jellegből az következne, hogy a jól vezető irányban a reflexió a fémekre jellemző nagy értéket mutat kis energiákon, majd élesen lecsökken. Ezért, bár a kristályok ritkán érik el a polarizált reflexióméréshez szükséges méretet, számos erőfeszítés történt a kísérleti problémák kiküszöbölésére és a polarizált fényben való reflexiós spektrumok felvé-



8. ábra. Egyszerű és komplex TCNQ-sók KBr pasztillában mért IR (látható) UV spektruma [14] (Ad: Akridinium, TEA: Trietilammónium)

telére. A kinolinium-TCNQ-ban [35, 36]  $10\text{ cm}^{-1}$ -ig nem találtak szabad töltéshordozók gerjesztéseire jellemző nagy reflexiót. Ugyanakkor a TTF—TCNQ-ban és analógjaiban [37, 38] az  $1,2\text{ eV}$  ( $10\,000\text{ cm}^{-1}$ ) körül jelentkező éles intenzitásváltozást többen fémes „plazma élként” értelmezték. A reflexió intenzitása azonban ez alatt az él alatt nem állandó, hanem ( $600\text{ cm}^{-1}$ -ig mérve) még egy, gyengébb minimum figyelhető meg rajta, ezért a spektrumnak ez a része két különálló maximumként is felfogható. Az utóbbi álláspontot képviselik Tanaka és munkatársai [13], akik az eddig legszélesebb körű egykristály-abszorpciós vizsgálatok alapján, a  $2000\text{ cm}^{-1}$  feletti tartományt molekuláris, illetve maximum két molekulára kiterjedő gerjesztésekkel magyarázzák, és ezekkel hozzák kapcsolatba a vezetési mechanizmust is. A helyzet nagymértékben bonyolítja, hogy a dimer intermolekuláris átmenete oldatban majdnem azonos helyen van a  $\text{TCNQ}^-$  ion legkisebb energiájú átmenetével, és a szilárd anyag színeképében sem különíthetők el egyértelműen. Mivel a molekulák síkja nem teljesen merőleges a kristallográfiai tengelyre, a polarizált mérések is többféleképpen interpretálhatók.

### 1.3.3. Rezgési spektroszkópia

A töltésátviteli sók rezgési spektruma a kiindulási molekulákéhoz képest két okból változhat:

- a) az oxidációfok változása
- b) a kristályban a környezet szimmetriájának változása.

Mindkét hatás egyes vonalak eltolódásában és intenzitásváltozásokban nyilvánul meg. Ha a szimmetriaváltozás az izolált molekulához képest nem jelentős (planáris szerves molekuláknál ez gyakran előfordul), akkor az infravörös spektrumból következtethetünk a donor—akceptor kölcsönhatás mértékére. Matsunaga [30] a



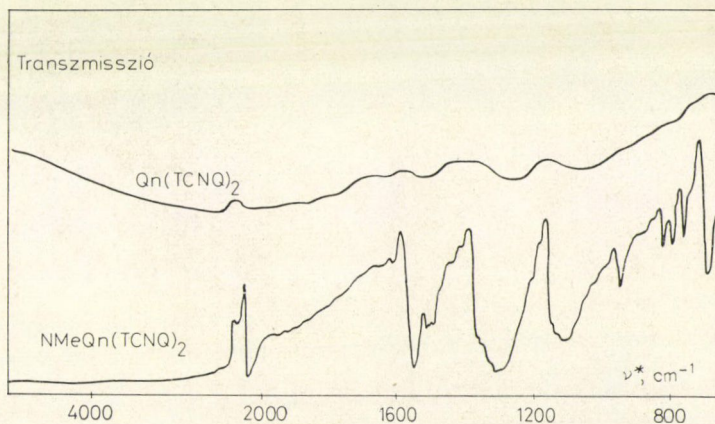
fenotiazin-jód komplexről infravörös spektruma alapján állapította meg, hogy ionos jellegű.

Infravörös spektrumok alapján választható ki több heteroatomot tartalmazó donormolekula esetén a donoratom [30]. Ha az alpmolekula rezgéseit egyenként azonosítani tudjuk a spektrumban, akkor a komplexképződés egyes kötésekre gyakorolt hatását is lemérhetjük. Egyéb esetekben csak összehasonlítási alapot kapunk a semleges molekula, illetve a molekulaion színekéből.

A halogének és interhalogének, illetve ionjaik szerkezetét Raman-aktív vegyértékrezgéseik felhasználásával lehetett felderíteni [39]. Ezzel a módszerrel — esetenként Mössbauer-spektroszkópiai mérésekkel kombinálva [40] — mutatták ki a keményítő-jód és hasonló rendszerekben trijodidláncok jelenlétét [41, 42].

Kevert vegyértékű sóknál, mint láttuk, a különböző oxidációfokú molekula-fajták közti töltésátvitel energiája az infravörös tartományba esik. Erre a széles sávra szuperponálódnak a rezgési csúcsok. A jól vezető TCNQ-sókban, ahol az elektronátviteli sáv maximuma igen alacsonyan,  $2500\text{ cm}^{-1}$  körül van, már nem is látunk éles rezgési csúcsokat, csak két széles, a normál rezgési sávoknál sokkal intenzívebb sávot a vázrezgések tartományában. Ez a jelenség számos kutató érdeklődését felkeltette. A rezgési spektrum normálkoordináta-analízisét TCNQ kristályok és 1:1 sók abszorpcióis, valamint egykristályos-reflexióis, igen részletes vizsgálatok alapján először *Pecile és munkatársai* végezték el [43, 44]. Az egyszerű sókban minden rezgési csúcsot intramolekuláris rezgésként le tudtak írni, anélkül, hogy a molekulák közti kölcsönhatást figyelembe kellett volna venniük. Komplex sókban is ( $\text{Cs}_2(\text{TCNQ})_3$ ,  $\text{Cu}(\text{TCNQ})_2$ ) meg tudták különböztetni a semleges és ionos TCNQ átmeneteit.

Jól vezető komplex sók polarizált infravörös reflexióját *Vlasova és munkatársai* [45] mérték, és azt találták, hogy a két széles sáv a láncok irányában polarizált. A láncra merőleges reflexióis spektrumban megjelennek a TCNQ és  $\text{TCNQ}^-$  rezgési csúcsai. Ennek alapján — más kutatókkal [36] összhangban — arra következtettek, hogy itt a molekuláris rezgéseket a szokásosnál jóval erősebb töltésvándorlás kíséri a lánc irányában, emiatt az intenzitás nagymértékben növekszik.



9. ábra. Kinolinium (Qn) és N-metilkinolinium (NMeQn)-TCNQ<sub>2</sub>-sók infravörös spektruma



Ezt az ún. elektron—fonon csatolást elméleti fizikai szempontból a legáltalánosabban Rice [46, 47] közleményei tárgyalják, egységbe foglalva a TCNQ és a kálium-[tetracianoplatinát]-halogén sókat.

Hogy az infravörös spektrum fent leírt „elkenődése” a vezetési elektronokkal való kölcsönhatással függ össze, azt az a tapasztalat is alátámasztja, hogy rosszabbul vezető komplex sókban a rezgési szerkezet sokkal kifejezettebben látszik, és a két említett széles sáv helyén keskeny rezgési csúcsokat észlelünk (9. ábra).

#### 1.3.4. Kristályenergia-számolások

Egy szerves töltésátviteli só kialakulásakor — gázfázisú donorból és akceptorból kiindulva — a következő módon írhatjuk fel az energiaváltozást:

$$\Delta E = I - A + E_M + E_p + E_k,$$

ahol  $I$  a donor ionizációs energiája,  $A$  az akceptor elektronaffinitása,  $E_M$  a kristály elektrosztatikus (Madelung-) energiája,  $E_p$  a polarizációs energia és  $E_k$  a delokalizált elektronok kinetikus energiája. Ha az utóbbi három tag összege nagyobb energia-csökkenést jelent, mint az ionizációs energia és az elektronaffinitás különbsége (ez általában pozitív), a rendszer stabil. Szervetlen ionkristályoknál a három tag közül az  $E_M$  elektrosztatikus potenciális energia a meghatározó, fémeknél pedig az  $E_k$  kinetikus energia. A fémes jelleget mutató töltésátviteli sók mindkét rendszerre hasonlítanak bizonyos szempontból, éppen ezért a kötési energia meghatározása bennük mind elméleti, mind kísérleti úton, igen lényeges. Sajnálatos módon, a kristályok hőérékenysége miatt, közvetlen termodinamikai mérési adatok nem állnak rendelkezésünkre. A felírt összeg egyes tagjai azonban mérhetők, vagy más kísérleti adatokból becsülhetők.

A molekulák ionizációs potenciálja és elektronaffinitása többé-kevésbé ismert [48]. A kinetikus energia értékét néhány tized elektronvoltnál nem becsülik nagyobbra [49], a polarizációs energia is hasonló nagyságrendű [50]. A néhány elektronvoltos elektrosztatikus energia ezek mellett dominánsnak tűnik, bár lényegesen kisebb, mint a szervetlen ionkristályokban. Fizikailag ez annyit jelent, hogy még a vezetésben részt vevő elektronok is sokkal erősebben vannak a rácspontokhoz kötve, mint a fémekben. Ez összhangban van az optikai eredményekkel is, és feljogosít a következő eljárásra: a kristályt első közelítésben tökéletes ionrácsnak tekintjük, amelyben a kötési energia tisztán elektrosztatikus, és a kinetikus, polarizációs stb. hatásokat csak ezután, perturbációként vesszük figyelembe. Az első lépésben az egyes atomokhoz a kvantumkémiailag számolással kapott molekuláris töltéseloszlás részleges töltéseit rendeljük. Így a töltések hozzárendelése az egyes rácspontokhoz nem mindig egyértelmű, különösen, ha a töltésátvitel nem teljes. Ezért ilyenkor több lehetséges modellt kell megvizsgálni.

A fent leírt alapfeltevésekkel Metzger végzett először számításokat szerves töltésátviteli sókra [51, 52]. Azt találta, hogy nem vezető sók esetén az  $I - A + E_M$  összeg előjeléből megállapítható, hogy az alapállapot ionos lesz-e vagy semleges. Vezető sókra ugyanakkor (NMP—TCNQ, TTF—TCNQ) a Madelung-energia nem fedezi az ionizációkor befektetett energiámenyiséget. Torrance és Silverman [53] szerint ez a közvetlen oka annak, hogy ezekben a vegyületekben a töltésátvitel nem teljes. Ha ugyanis egy láncon belül a molekulák mindegyike ionizált, ez a kis molekula-távolság miatt igen nagy taszítást eredményez a szomszédok között, amit a — távo-



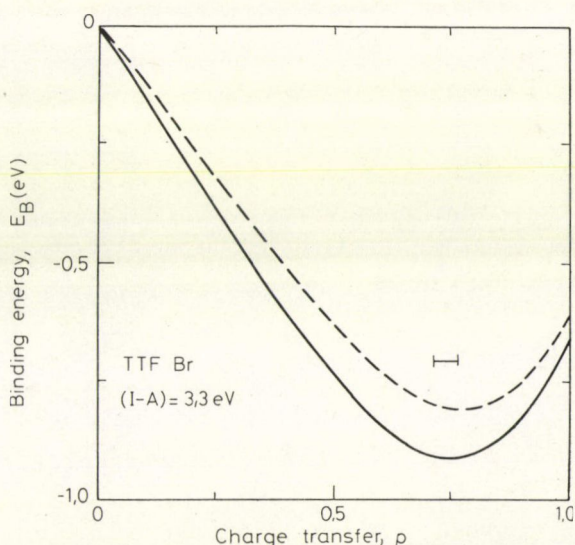
labb levő — környező láncok által kifejtett vonzás nem tud kompenzálni. A kristály ezért úgy stabilizálódik, hogy csak részben ad át töltést, ami kétféle módon történhet: vagy a sztöchiometria nem 1:1, vagy az ellenionok között is vannak semlegesek.

A kötési energia ilyenkor a következő kifejezéssel írható le (a kisebb tagokat elhanyagolva):

$$E_B = -q[E_M(q) - (I - A)]$$

ahol  $q$  a töltésvitel mértéke. *Torrance* és *Silverman* [50, 53] becslése szerint  $E_B$   $q$  függvényében minimumot ad. Két rendszerre, a TTF—Br és TTF—TCNQ-ra végeztek részletes számításokat. TTF—Br esetén a minimum helye a kísérletileg tapasztalt TTFBr<sub>0,79</sub> összetételhez adódott (10. ábra). A TTF—TCNQ-ban az  $E_B(q)$  függvényből annyi derül ki, hogy a részleges (0,5 körüli) töltésvitel energetikailag lényegesen kedvezőbb, mint a teljes, de a Madelung-energia még itt sem éri el az ionizációs energia és az elektronaffinitás különbségét. Ha  $q=0,5$ -nél figyelembe vesszük az összes többi energiajárulékot is [50], gyengén kötő állapotot kapunk ( $E_B = -0,2$  eV). Ez a 0,5 körüli töltésvitel adódik fotoelektronspektroszkópiai mérésekből is [54]. A számított kis kötési energia miatt a hasonló, jól vezető 1:1 sók energiaviszonyai továbbra is az érdeklődés középpontjában állnak, és nem tekintetők tisztázottnak.

Nem vezető 1:1 vegyületek Madelung-energiája a  $0 < q < 1$  tartományban monoton csökken, és  $q=1$ -nél a kötés jóval stabilabb ( $E_B$  néhány eV nagyságrendű) [48]. *Torrance* [53] szerint a függvény itt 1-nél nagyobb értéknél mutatna minimumot,



10. ábra. A TTF-Br<sub>q</sub>  $E_B$  kötési energiája a brómtartalom függvényében [53]. A szaggatott görbe a kinetikus energia figyelembevétele nélkül, a folytonos a kinetikus energiát beszámítva készült. A szakasz a kísérleti sztöchiometriai tartományt jelzi.



ez azonban fizikailag irreális (pl. alkálisók esetén), ezért lesz a kristályban teljes ionizáció.

A kristályenergiák függése a molekulán belüli töltéeloszlástól nem túlságosan erős [57], de a részleges töltésátvitelkor az energia nagyon függ attól, hogy a töltéseket egyes molekulákra lokalizáltnak, vagy a teljes láncon delokalizáltnak tekintjük (azaz minden rácsponthoz  $q$  töltést rendelünk). Az előbbi eset lényegesen nagyobb stabilitású („modulált töltéssűrűség”) [53]. Ez további érvet jelent a Madelung-számolások igazolására és a molekuláris modell jogosságá mellett.

#### 1.4. A tetratiotetracén és sói

A tetratiotetracént (naftacéno-[5,6-cd: 11,12-c'd']-bisz[1,2]ditiol, 1. ábra) 1948-ban *Marschalk* [58] állította elő tetracén és kén reakciójával. *Marschalk és Clar* behatóan foglalkozott a TTT kémiai tulajdonságaival [59, 60]. Már ők észrevették, hogy az anyag viszonylag könnyen ionizálható, oxidálószer hatására a zöld színű vegyület vörös gyök-iont képez. Az acetátot, amelyben +1, és a di(hidrogénsulfát)-ot, amelyben +2 oxidációfokkal szerepel, izolálni is tudták, és szintetizálták a szelénanalógot is [61]. Mivel eredetileg zöld festékanyag céljára készítették a TTT-t, elektromos tulajdonságait nem vizsgálták.

Tizenöt év múlva *Matsunaga* mérte néhány TTT-töltésátviteli só ellenállását [62] és köztük  $10 \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$  vezetőképességeket is talált. Ennek nyomán állították elő *Perez-Albuérne és munkatársai* [63] a TTT halogénnel és pszeudohalogénnel képzett sóit TTT-acetátból cserebomlással: a bromidot, kloridot, jodidot és rodanidot. A bromid és klorid esetén 1:1 sókat kaptak, a jodidnál és rodanidnál ezzel szemben az aniontartalom 0,7—1 között változott. Az anyagok metanolos oldatának látható/UV spektruma a semleges TTT-étől erősen eltért, ezért azt a  $\text{TTT}^+$  kationnak tulajdonították. Ezt a feltevést igazolta *Geiger* [24] az elektrokémiailag oxidált TTT oldat spektrumával. A 11. ábrán a két spektrum mellett feltüntettük a  $\text{TTT}^{2+}$  ionét is. Ez a TTT tömény kénsavas oldatában észlelhető [64].

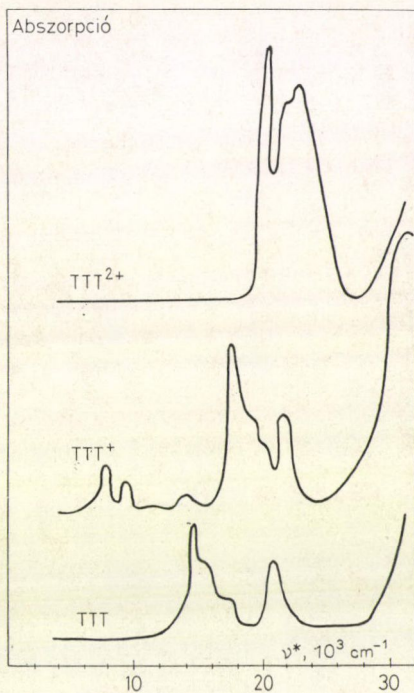
A minták infravörös spektrumában a vonalak helye szintén megegyezett és a TTT-étől különbözött, de a  $\text{Cl}^- - \text{Br}^- - \text{SCN}^- - \text{I}^-$  sorrendben egy energiában lefelé tolódó erős, széles abszorpciós sáv fokozatosan elnyomta a rezgési sávok intenzitását. A fenti sorrendben a vezetőképesség nőtt, és a jodidé — préselt pormintán — szobahőmérsékleten elérte a  $15 \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$ -et.

*Segolev és munkatársai* 1976-ban [65] a TTT-jodot TTT és jód reakciójával szintetizálták. Egy igen jól vezető fázist találtak, körülbelül 2:3 donor—akceptor aránnyal ( $\sigma_{\text{szobahőm.}} = 1000 \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$ , egykristályon a jól vezető irányban mérve). Az összetétel azonban nem pontosan sztöchiometrikus és nem is szigorúan állandó, hanem a kiindulási oldatbeli koncentrációtól és a hűtési sebességtől függően 3—3,4  $\text{I}/2 \text{ TTT}$  között változik [66]. Más laboratóriumok (köztük a KFKI) megfigyelései [67, 68] megerősítették ezt a megállapítást, sőt, a sztöchiometrikus vegyületet nem is sikerült előállítani. Röntgendiffrakciós vizsgálatok kiderítették [69, 70], hogy a kristályban a TTT és a jód külön-külön láncokat alkot, a két alrács periódusa a láncok irányában különböző, a jódrács periódusa  $1.92b$  ( $b$  a TTT alrács elemi cellájának élhossza). A szerkezet vetületét a láncokra merőleges síkra, illetve láncirányban a 12. ábra mutatja.

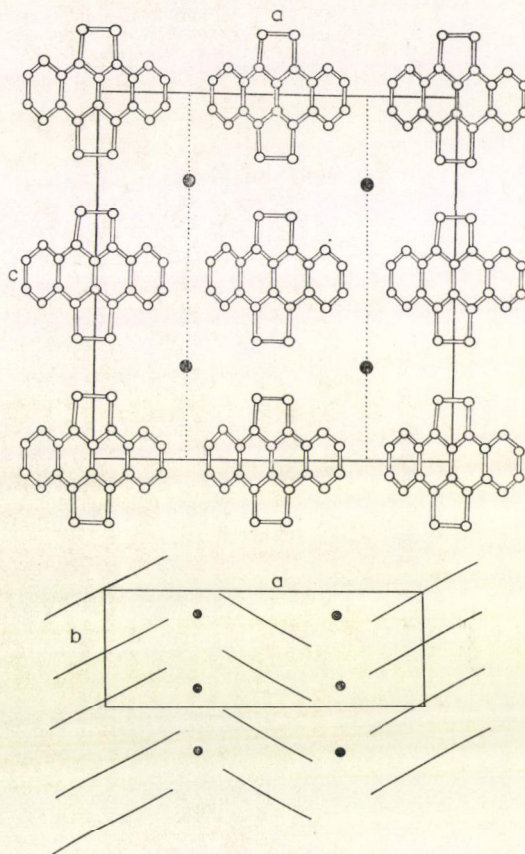
Az elektromos és egyéb fizikai tulajdonságok mélyebb megértéséhez természete-



sen szükség van a TTT és sói képződésének, fizikai-kémiai tulajdonságainak behatóbb ismeretére. Mivel a TTT több halogénnel alkot sót, az is várható volt, hogy sorozatok vizsgálatával legalább kvalitatív következtetések vonhatók le a kémiai jellemzők (elektronaffinitás, ionméret) és a szilárdtestfizikai tulajdonságok kapcsolatára nézve. Figyelembe véve a kísérleti lehetőségek határait, a következő célkitűzések és módszerek látszottak reálisnak:



11. ábra. A TTT, a  $\text{TTT}^+$  és a  $\text{TTT}^{2+}$  abszorpciós spektruma  
(oldószer: TTT benzol  
 $\text{TTT}^+$  metanol  
 $\text{TTT}^{2+}$  cc.  $\text{H}_2\text{SO}_4$ )



12. ábra. A  $\text{TTT}_2\text{I}_3$  kristályszerkezete,  
a) láncokra merőleges vetület, b) láncirányú vetület

1. Képződési sztöchiometria, különböző szilárd fázisok, az egykristálynövesztés lehetőségének vizsgálata (kémiai analízis, konduktometriás titrálás, különböző preparálási módszerek összehasonlítása).

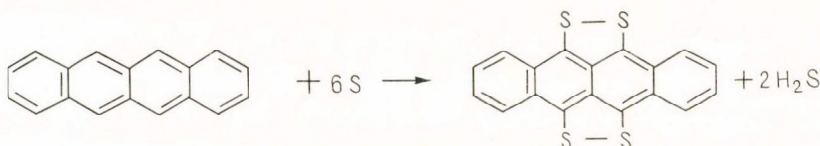
2. A molekulák oxidációfokának, asszociációs állapotának meghatározása oldat- és kristályos fázisban (oldatspektroszkópia, diffúz reflexiós spektroszkópia, rezgési spektroszkópia).

3. A kristályok szerkezetének összehasonlítása (röntgendiffrakció pormintákon).
4. Elméleti számítások a kristályok stabilitására a geometria és a töltéeloszlás függvényében (Madelung-energia számolás).

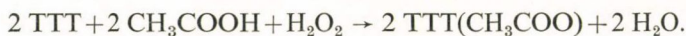
## 2. KÍSÉRLETI METODIKA ÉS SZÁMÍTÁSI MÓDSZEREK

### 2.1. A vegyületek előállítása és analízise, kristályszerkezet-meghatározás

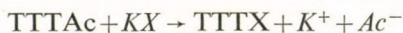
A tetratietetracént és sóit *Ritvayné dr. Emandity Katalin* állította elő. A tetratietetracént szintézise *Marschalk* [58] módszerével történt, tetracénből, nitrobenzolos oldatban:



A kapott zöld színű, kristályos vegyületet jégcetben hidrogénperoxiddal forralva, vörös színű csapadék válik ki, amely poláros oldószerekben (metanol, víz) rendkívül jól oldódik.



A fenti két vegyület a további TTT-sók kiindulási anyaga. Az acetátból és alkáli-sókból cserebomlással, metanolos oldatban állíthatók elő újabb sók:



(X az anion:  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{I}^-$ ,  $\text{Br}^-$ ,  $\text{SCN}^-$ ).

Közvetlen redox reakcióval, a jód és a bróm esetén, TTT nitrobenzolos oldatából indulunk ki, és ehhez adunk elemi halogént:



ilyenkor az összetétel többféle lehet, és eltérhet a sztöchiometrikustól.

Az összetétel megállapítása standard kémiai analízissel történt az ELTE Szerves Kémiai Tanszék mikroanalízis laboratóriumában. Az aniontartalmat minden esetben ismerjük, teljes analízist (a minták kis mennyisége miatt) csak a TTT-n magán és egyes anyagokon szűrőpróbaszerűen végeztettünk. Jódtartalmat a KFKI-ban *Szirmai Lászlóné* és *Bakos László* is mért izotóphígításos analízissel.

Teljes röntgendiffrakciós szerkezetmeghatározásra, elsősorban a kristályok kis mérete miatt, nem volt lehetőség. Guinier-kamrás porfelvételekből és az irodalomból ismert adatokból annyit lehetett megállapítani, hogy a mért minta szerkezete az ismert szerkezettel megegyezik-e vagy sem. Mivel irodalmi adatok is csak a TTT-jódra léteznek, ennek a TTT—I és a TTT—I—Br ötvözet esetén volt értelme. A Guinier-kamrás felvételeket *Zsoldos Lehelné* készítette.

A TTT-jód oldatreakciót konduktometriás titrálással is tanulmányoztuk. *Gutmann* [71] szerint egy donor—akceptor só egyik komponensét a másikkal titrálva, az oldat vezetőképessége a sztöchiometrikus aránynál maximumot mutat. Konduktometriás titrást diklórmetánban, Radelkis üvegelektroddal és Radiometer konduktóméterrel végeztünk.



## 2.2. Spektroszkópiai vizsgálatok

### 2.2.1. Oldatspektrumok

Az oldatspektrumokat SP—700 (Pye Unicam) látható /UV/ közeli infravörös spektrofotométeren vettük fel,  $4000\text{—}36\,000\text{ cm}^{-1}$  ( $2500\text{—}160\text{ nm}$ ) tartományban. Oldószerként benzolt, 1,2,4-triklórbenzolt, metanolt, illetve diklórmetánt használtunk. A közvetlen, oldatspektrumokból történő összetétel-meghatározást megnehezítette az a tény, hogy a semleges és ionizált TTT oldhatósága igen eltér egymástól — a semleges molekula apoláros, az ion poláros oldószerekben oldódik jól. Olyan rendszerekre, ahol mindkét molekulafajta előfordul, a diklórmetán bizonyult az egyetlen lehetséges, spektroszkópiai célra is megfelelő oldószernek. Ennek egyetlen hátránya, hogy erősen kedvez a trihalogenidképződésnek [72], ezért az anionok kristálybeli állapotát nem feltétlenül tükrözik az oldatspektrumok.

A  $[TTT]/[TTT^+]$  arány megállapítása nem annyira egyszerű, mint a TCNQ sók esetén, a két spektrum erős hasonlósága miatt (11. ábra). Ezt tovább nehezíti a rossz oldhatóság, ami kis intenzitású sávokat, ezzel nagyobb relatív hibát okoz az intenzitásarányok megállapításában. Ezért az oldatspektrumok a különböző molekulafajták jelenlétének detektálására és arányuk közelítő meghatározására alkalmazhatók, de összetétel-meghatározásban nem pótolják a kémiai analízist.

### 2.2.2. Diffúz reflexiós spektrumok

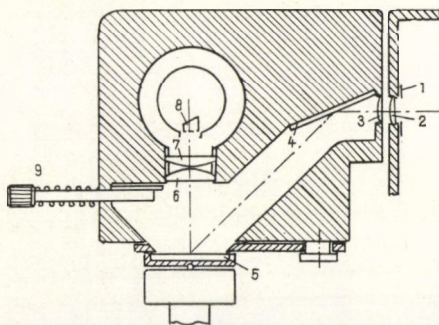
A diffúz reflexiós spektrumok felvétele RA 2 remissziós feltéttel ellátott OPTON PMQ II egysugaras spektrofotométeren történt, az ELTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékén. A 13. ábra a remissziós feltét felépítését mutatja.

A mintára (5)  $45^\circ$ -ban beeső fény a szemcséken reflektálódik, majd a felületről az érzékelő fotokatódra (8) kerül. A forgatható mintatartóval (9) a referencia- és a mérendő anyagot felváltva visszük a fényútba, és a minta reflexióját (a standard reflexiójának %-ában) mérjük a hullámszám függvényében.

Mivel a diffúz reflexióra szigorú elméletek nem alkalmazhatók, az optimális kísérleti körülmények megválasztásában jelentős szerepet kap az empiria. Az optimális rétegvastagságra, szemcseméretre, abszorpciótartományra stb. Kortüm és munkatársai végeztek igen sok mérést, amit Kortüm könyve [73] foglal össze.

A referenciaanyag használata a beeső és reflektált fény intenzitásarányának mérését helyettesíti. A referenciaanyag abszolút reflexióját a hullámhossz függvényében ilyenkor természetesen ismernünk kell. Erre a célra olyan anyag alkalmas, amelynek abszolút reflexiója 1-hez közeli, a hullámhossztól széles határok között független érték. Az általunk használt bárium-szulfát rendelkezik ezekkel a tulajdonságokkal, amellet felülete hosszabb időn át sem változik.

Erősen abszorbeáló anyagoknál a reguláris reflexió torzító hatása már igen jelentős. Ezt a szemcseméret csökkentésével ( $1\text{ }\mu$  körüli méretre) és alkalmas, nem



13. ábra



abszorbeáló anyaggal való hígítással küszöbölhetjük ki. Ha a hígítóanyag és a vonatkoztatási anyag azonos, a reguláris reflexió által okozott torzulások nagyrészt kompenzálják egymást. *Kortüm* szerint [73] a hígításnak olyannak kell lennie, hogy a reflexióból számolt  $F(R_\infty)$  végig 0,3–0,6 közé essen, ugyanis itt a legkisebb a Kubelka—Munk-függvény hibája. A TTT-vegyületeknél ez kb. 1:100 súlyarányú hígítást jelentett. Az azonos diszperzitásfokot és a homogén keveredést golyósmalomban való őrléssel biztosítottuk. Az ilyen hígított porok szórási koefficiense gyakorlatilag a nagy feleslegben levő hígítóanyagével, abszorpciós koefficiense a mintáéval egyezik meg:

$$\frac{(R_D - 1)^2}{2R_\infty} = \frac{K + K_{st}}{S_{st}} = \frac{K}{S_{st}}.$$

$S_{st}$  hullámhosszfüggése mérhető, a legtöbb referenciának használt anyagra, így a  $\text{BaSO}_4$ -ra is, az  $1\ \mu$  alatti mérettartományban az összefüggés lineáris.

A kiértékeléskor tehát figyelembe kell venni a  $\text{BaSO}_4$  abszolút reflexiójának hullámszámfüggését (a használt Merck spektroszkópiai tisztaságú készítményét a gyártó cég a vegyszerhez mellékeli) és a szórási együttható hullámszámmal való változását is [73]. Ellenkező esetben az UV felé növekvő mértékben ellaposodó intenzitású spektrumot kapunk. A Kubelka—Munk-függvény kiszámítását és a korrigálást saját készítésű számítógépes programmal végeztük [74]. A leolvasás hibája max. 5%, a kapott spektrumok szórása 10–20% között volt.

### 2.2.3. Infravörös spektrumok

Infravörös spektrumokat részben az ELTE Szervetlen és Analitikai Tanszékén levő Spektromom 2000 spektrofotométeren vettünk fel, a pontosabb, nagyobb felbontású felvételeket *Mink János* és *Kemény Gábor* készítette az MTA Izotóp Intézet Digilab típusú Fourier-spektrométerén. A mérések minden esetben KBr pasztillákon történtek, 1 mg/0,5 g hígítással,  $1\ \mu$  alatti szemcsemérettel. Az előzőekben már említett fényszórási effektusok egy lineárisan emelkedő alapvonalat eredményeztek, az egyes esetekben megjelenő, elektronátmenettel magyarázható elnyelési sáv ezt tovább bonyolította. Ezért még a Digilab készüléken mért eredmények is csak félkvantitatív kiértékelésre adnak módot.

### 2.2.4. Transzmissziós mérések a közeli infravörös tartományban

A diffúz reflexiós és az infravörös spektrofotométer hullámszámtartománya között, a közeli infravörösben ( $4000\text{--}10\,000\ \text{cm}^{-1}$ ) KBr pasztillába préselt minták transzmisszióját használtuk fel. Ezeket a méréseket *Grüner György* végezte a groningeri egyetem Cary 14 spektrofotométerén. Mivel ebben a tartományban (ahol a szemcseméret alig kisebb a gerjesztő fény hullámhosszánál) mind a reguláris, mind a diffúz reflexió által okozott torzulás kicsi, nagy hígítással készült, kis szemcseméretű, homogén mintákon elég jó felbontású, reprodukálható spektrumokat kapunk. Az intenzitásokat a  $10\,000\text{--}15\,000\ \text{cm}^{-1}$  szakaszon a diffúz reflexiós spektrumokhoz,  $4000\text{--}5000\ \text{cm}^{-1}$  között az infravörös spektrumokhoz normáltuk. Ezt az eljárást először olyan TCNQ-sókra próbáltuk ki, amelyek diffúz reflexiós és KBr pasztillában mért transzmissziós spektruma az irodalomból a teljes  $1000\text{--}40\,000\ \text{cm}^{-1}$  tartományon ismert volt. Az így kapott jó egyezés alapján merjük ezt a módszert követni a TTT-vegyületek esetében is.



### 2.3. Madelung-energia számítások

A Madelung-energia meghatározása — az egyszerűsítés kedvéért kétfajta ionból álló kristályra — lényegében a következő összeg kiszámítását jelenti:

$$E_M = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i>j}}^N \frac{z_i z_j}{r_{ij}} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N z_j \Psi_j; \quad \Psi_j = \sum_{i=1}^N \frac{z_i}{r_{ij}}$$

ahol  $N$  az 1 mólnyi anyagban levő ionok száma,  $z_j$  egy kiválasztott ion töltése,  $r_{ij}$  pedig az  $i$ -edik iontól való távolsága. Váltakozó előjelű töltésekből álló lineáris láncra (14. ábra) a  $\Psi_j$  Madelung-potenciál:

$$\Psi_j = 2 \left[ \frac{1}{R_0} - \frac{1}{2R_0} + \frac{1}{3R_0} - \frac{1}{4R_0} \dots \right].$$

Bevezetve az  $\alpha$  ún. Madelung-állandót:

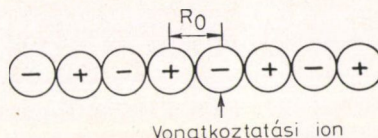
$$\alpha = \frac{\Psi_j}{|z|} R_0 = 2 \left[ 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} \dots \right] = 2 \ln 2.$$

Általánosítva  $\alpha$  definícióját:

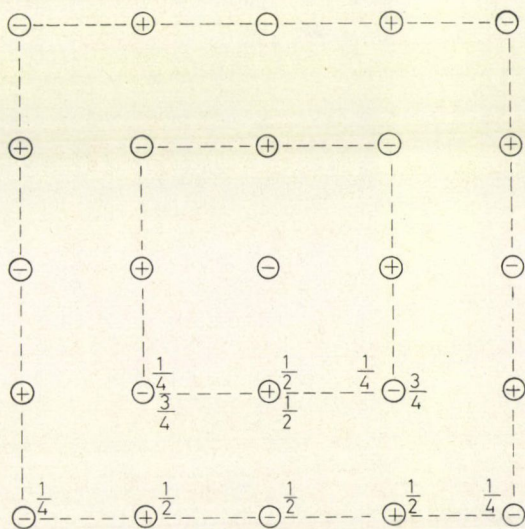
$$\alpha = \frac{-\Psi_j R_{\pm}}{x e^2},$$

(ahol  $x$  az iontöltések legnagyobb közös osztója,  $R_{\pm}$  az ellentétes töltésű ionok legkisebb távolsága), olyan mennyiséget kapunk, ami csak a kristályszerkezettől függ, a rácsállandótól nem.  $\alpha$  természetesen csak olyan kristályrácsokra jellemző, amelyekben minden legközelebbi szomszéd azonos távolságra van a vonatkoztatási iontól. Háromdimenziós esetben  $\Psi_j$  analitikusan nem írható fel, és a numerikus összeg konvergenciája lassú. ( $\Psi_j$  ezenkívül a tagok sorrendjétől is függ, mivel a sor feltételeesen konvergens, azonban kimutatható, hogy — ha nagyjából tartjuk magunkat ahhoz, hogy a tagokat  $r_{ij}$  növekvő sorrendjében írjuk fel — ez a függés elhanyagolható [77]).

A konvergencia javítható azáltal, hogy a számolást az *Evjen* által használt elrendezés alapján végezzük. Az ionokat többé-kevésbé semleges csoportokra osztjuk, és ha szükséges, tört-értékű töltésekkel számolunk. Az ilyen semleges kép-



14. ábra



15. ábra. Evjen-féle elrendezés kétdimenziós kristályrácsban

zödmény potenciálja ugyanis sokkal gyorsabban csökken a távolsággal, mint az olyané, amelynek eredő töltése van. Ilyen elrendezést mutat kétdimenziós rácsra a 15. ábra.

Ewald módszere [78] már valamivel bonyolultabb átalakításokon alapszik. A teljes potenciált egy ion helyén két különböző, de egymással kapcsolatban levő potenciál összegeként írja fel:

$$\Psi_j = \Psi_1 + \Psi_2.$$

A  $\Psi_1$  potenciál minden ion helyén egy Gauss-féle töltéeloszlás potenciálja; előjele ugyanolyan, mint az ioné. A töltéeloszlás a kiválasztott pontban nem járul hozzá a  $\Psi_j$  potenciálhoz, ezért  $\Psi_1$  a következő különbséggel írható fel:

$$\Psi_1 = \Psi_a - \Psi_b,$$

ahol  $\Psi_a$  Gauss-eloszlások folytonos sorozatának potenciálja,  $\Psi_b$  pedig a kiszemelt ion helyén egyetlen Gauss-eloszlásé (16. ábra).  $\Psi_2$  a ponttöltésekből álló rács potenciálja, ezekre szuperponált ellentétes előjelű Gauss-féle eloszlásokkal.

A Gauss-eloszlás szélességét meghatározó paraméterek megfelelő megválasztásával az eljárás mind a két részre egyidejűleg jól konvergáló előállítást tesz lehetővé. A Gauss-eloszlások teljesen kiesnek a  $\Psi_1$  és  $\Psi_2$  függvényt meghatározó egyes töltéseloszlásokra való összegezésnél, úgyhogy az eredő  $\Psi_j$  független a szélesség választott paraméterétől; ez utóbbitól csak a konvergencia gyorsasága függ.  $\Psi_a$  Fourier-sorfejtéssel átranzformálható a reciprok térbe, így az egyik tag a közeli, a másik a távoli töltések hatását veszi nagyobb súllyal figyelembe.

Egy  $q_i$  töltésű ionhoz tartozó Gauss-eloszlás:

$$\varrho(r) = q_i \left( \frac{\eta}{\pi} \right)^{3/2} e^{-\eta r^2 / V^{2/3}},$$

ahol az  $\eta$  paraméter szabja meg a görbe félértékszélességét (nagy  $\eta$ -hoz gyors, kis  $\eta$ -hoz lassú lecsengés tartozik).  $V$  az elemi cella térfogata,  $V^{1/3}$  a cella nagyságára jellemző, rácsállandó jellegű mennyiség.

A Madelung-energia a fenti potenciálokkal és az ismertetett átalakítások után a következőképpen írható fel [51]:

$$E_M = \sum_{j=1}^N \Psi_j z_j = A + B + C + E^r,$$

$$A \equiv - \frac{N_A |e|^2}{\sqrt{\pi}} \frac{\eta^{1/2}}{Z_e V^{1/3}} \sum_{n=1}^M z_n^2,$$



$$B = \frac{4\pi N_A |e|^2}{2Z_e V} \sum_{n=H}^H \sum_{k=-K}^K \sum_{l=-L}^L \frac{1}{d_{hkl}^2} \exp\left(\frac{-d_{hkl}^2 V^{2/3}}{4\eta}\right) \times$$

$$\times \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^M z_n z_m \exp[i d_{hkl}(r_n - r_m)],$$

$$C = \frac{N_A |e|^2}{2z_e} \sum_{e=-E}^E \sum_{f=-F}^F \sum_{g=-G}^G \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^{M'} \frac{z_m z_n}{|\mathbf{r}_m + \mathbf{l}_{efg} - \mathbf{r}_n|} \times$$

$$\times \left[ 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\eta^{1/2}}{V^{1/3}} (\mathbf{r}_m + \mathbf{l}_{efg} - \mathbf{r}_n)\right) \right],$$

$$\text{ahol } \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt$$

$e$  az elemi töltés,  $V$  az elemi cella térfogata,  $N_A$  az Avogadro-szám,  $Z_e$  az egy elemi cellában található molekulák száma,  $M$  az egy elemi cellában levő atomok száma,  $\mathbf{l}_{efg}$  és  $\mathbf{d}_{hkl}$  pedig a direkt, illetve reciprok rács rácsvektorai:

$$\mathbf{l}_{efg} = e\mathbf{a} + f\mathbf{b} + g\mathbf{c}$$

$$\mathbf{d}_{hkl} = 2\pi(h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*)$$

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^* = 1, \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}^* = \mathbf{a} \cdot \mathbf{c}^* = 0 \quad \text{stb.}$$

A  $\sum'$  jelölés azt jelenti, hogy az atomok önmagukkal való kölcsönhatását kihagyjuk,  $\sum''$  pedig, hogy a  $h=k=l=0$  ( $\mathbf{d}_{hkl}=0$ ) tagot nem vesszük figyelembe.

A konstans,  $\mathbf{B}$  a reciprok,  $\mathbf{C}$  a direkt rácson vett összeg. Ha ezeket a tagokat összevetjük az előzőekben felírt potenciátagokkal, látható, hogy az  $A$  energiataag a  $\Psi_b$ ,  $B$  a  $\Psi_a$ ,  $C$  pedig a  $\Psi_2$  potenciálnak felel meg.  $E^{\text{tr}}$  az ún. „csonkítási hiba”, ami a figyelembe nem vett tagokból származik, és az  $E, F, G, H, K, L$  összegzési határok növekedésével 0-hoz tart.

$E_M$  független  $\eta$ -tól, de az egyes tagok nem. Ezért a konvergenciakritérium  $A+B+C$   $\eta$ -függetlensége.

Molekulákból vagy molekulaionokból álló kristályok esetén a Madelung-energia számítása úgy történik, hogy a kvantumkémiai módszerekkel számolt molekulán belüli töltéseloszlás alapján megfelelő tört töltéseket rendelünk az egyes atomokhoz, és azokat a számolás során különálló ionoknak tekintjük. Tekintetbe kell venni azt is, hogy a molekulákon belül az atomokat kovalens kötések tartják össze, ezért a molekulán belüli Coulomb-kölcsönhatás figyelembevétele az eredményeket meghamisítaná (hiszen mi a kristály képződésekor fellépő energiaváltozásokra vagyunk kíváncsiak, a molekulákból kiindulva). Ezért a molekulán belüli tagokat a kapott  $E_M$  értékből le kell vonni.

A számolást Metzger [51] leírása alapján az Ewald-módszer szerint, Kertész Miklóssal közösen írt FORTRAN programmal az MTA SZTAKI CDC 3300 számítógépen végeztük. A programot először egyszerű alkálisókra (NaCl és CsCl), majd a TTF—TCNQ-ra teszteltük, mivel erre már több irodalmi adat ismert volt [53, 55, 56, 57]. Ekkor merült fel annak szükségessége, hogy a konvergenciatalaj-



donságokat széles  $\eta$  tartományban vizsgáljuk. Az irodalmi  $\eta$  értékek ugyanis általában 1—10 között mozognak és  $E_M$  2—3 egységen keresztül  $\eta$ -független. Szerves kristályok, pl. a TTF—TCNQ esetén pedig az 1—10 közötti  $\eta$  tartományban erős  $\eta$ -függést tapasztalunk. A számítási eljárást és az  $\eta$ -függéseket a Függelék tartalmazza.

### 3. EREDMÉNYEK

#### 3.1. Előállítás, összetétel, a különböző szilárd fázisok összetétel-tartományának meghatározása

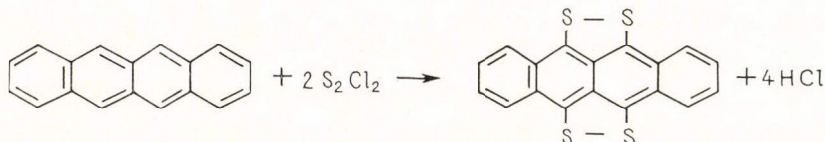
A tetratietetracén sóinak egyik jellemző tulajdonsága a változatos összetétel. A vizsgált vegyületek között igen sokféle donor—akceptor arány fordul elő (3. táblázat). A cserebomlással, TTT acetát és alkálisó reakciójával szintetizált anyagok közül csak a bromid szigorúan 1:1 összetételű. A rodanid valamivel kevesebb aniont

#### III. TÁBLÁZAT

A TTT és vegyületeinek elemanalízis-adatai

	C	H	S	N	O	I	Br	Cl %	Összegképlet
TTT	61,7	2,2	36,5						$C_{18}H_8S_4$
TTT-Ac	53,3	4,2	22,0		22,3				$C_{18}H_8S_4CH_3COO \cdot$ $3 CH_3COOH$
TTTSCN	55,3	2,8	38,2	3,1					$C_{18}H_8S_4(SCN)_{0,9}$
TTTCl								5,1	$C_{18}H_8S_4Cl_{0,5}$
TTTBr							16,9		$C_{18}H_8S_4Br$
TTTTI 1.						5,3			$C_{18}H_8S_4I_{0,2}$
TTTTI 2.						19,4			$C_{18}H_8S_4I_{0,67}$
TTTTI 3.						27,0			$C_{18}H_8S_4I$
TTTTI 4.						32,8			$C_{18}H_8S_4I_{1,35}$
TTTTI 5.						37,3			$C_{18}H_8S_4I_{1,65}$
TTTTI 6.						49,0			$C_{18}H_8S_4I_{2,66}$
TTTTI 7.						50,3			$C_{18}H_8S_4I_{2,80}$
TTTTIBr 1.						26,3	7,5		$C_{18}H_8S_4I_{1,1}Br_{0,5}$
TTTTIBr 2.						19,9	10,1		$C_{18}H_8S_4I_{0,8}Br_{0,7}$

tartalmaz ( $\approx$  TTTSCN<sub>0,9</sub> összetételnek megfelelően). A klorid elemanalízis útján megállapított összetétele TTT<sub>2</sub>Cl. (Ugyanilyen a donor—klór arány a TTT szelén-analógjának kloridjában is [79].) A TTT monokloridját kis mennyiségben a

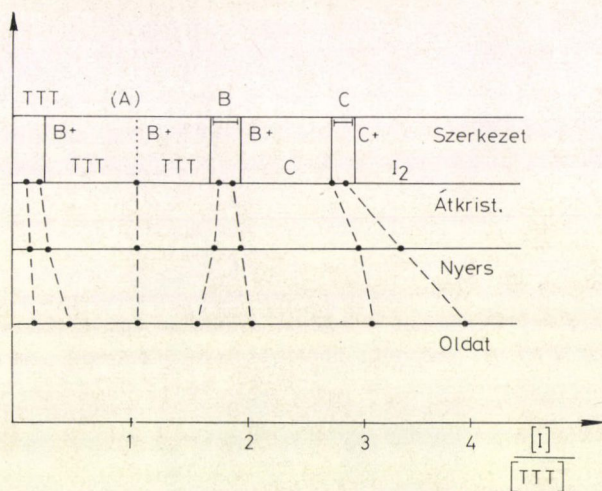


reakció melléktermékeként sikerült izolálni és oldatspektruma alapján azonosítani. A monoklorid — a többi 1:1 sóhoz hasonlóan — vörös színű por, míg a TTT<sub>2</sub>Cl színe, kevert vegyértékállapotra jellemzően, fekete.



Ha semleges TTT-ből és akceptorból indulunk ki, a keletkező kristályok összetétele az oldatbeli koncentrációaránytól és a hűtési sebességtől függ. (A reakció  $240^\circ$ -on megy végbe, kb.  $200^\circ\text{C}$ -on válnak ki az első kristályok.) Az összetétel átkristályosítás hatására is változik. Ezért vizsgáltuk részletesen a TTT-jód rendszer különböző koncentrációjú szilárd fázisainak képződését, többszöri átkristályosítás és minden lépésben kémiai analízis, illetve röntgenvizsgálat segítségével.

Az átkristályosítások során azt találtuk, hogy a kristályok jódtartalma jól definiált összetételekhez konvergál — az ezeknél valamivel nagyobb jódtartalmú mintákban a jódkoncentráció az átkristályosítások során csökken, a valamivel kisebb jódtartalmúakban pedig nő. Ezt a folyamatot sematikusán a 17. ábra szemlélteti.



17. ábra. A TTT-jód rendszer különböző szilárd fázisai

Az átkristályosítások során a következő összetételekhez közeli jódtartalmat kaptunk:  $\text{TTTI}$ ,  $\text{TTT}_2\text{I}_3$  és  $\text{TTTI}_3$ . Szigorúan sztöchiometrikus vegyületek általában nem jönnek létre, a minták  $[\text{I}]/[\text{TTT}]$  aránya még azonos előállítási körülmények esetén is  $\pm 15\%$  szórást mutat. Az 1:1 összetételű minta — a röntgen-szerkezetvizsgálat tanúsága szerint — TTT és a  $\text{TTT}_2\text{I}_3$  összetételű B fázis keveréke, és nem a *Buravov* és *Segolev* által [69] leírt A fázis. A 2:3 összetételű anyag sárgás, az 1:3 összetételű kékes, fémes fénnel csillogó kristályok alakjában válik ki.

Az ugyanilyen módszerrel előállított brómvegyület összetétele lényegesen nagyobb szórást mutat. A kétszeri átkristályosítás során kapott összetételeket a 4. táblázat tartalmazza. Az anyag az egyszerű sókhoz hasonló, mélyvörös színű por.

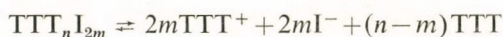
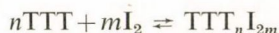
$\text{TTTI}$  és  $\text{TTTBr}$ , vagy TTT,  $\text{I}_2$  és  $\text{Br}_2$  nitrobenzolos oldatának elegyítésekor a  $\text{TTT}_2\text{I}_3$ -hoz hasonló, aranyos csillogású, kristályos anyagot nyerünk. Az elemanalízis jód és bróm jelenlétét egyaránt kimutatja. Kétfajta összetételű anyagot sikerült így előállítani, mindkettő összetétele  $\text{TTT}_2\text{X}_3$  körül volt:  $\text{TTT}_2\text{I}_{2.2}\text{Br}$ , illetve  $\text{TTT}_2\text{I}_{1.6}\text{Br}_{1.4}$ .

## IV. TÁBLÁZAT

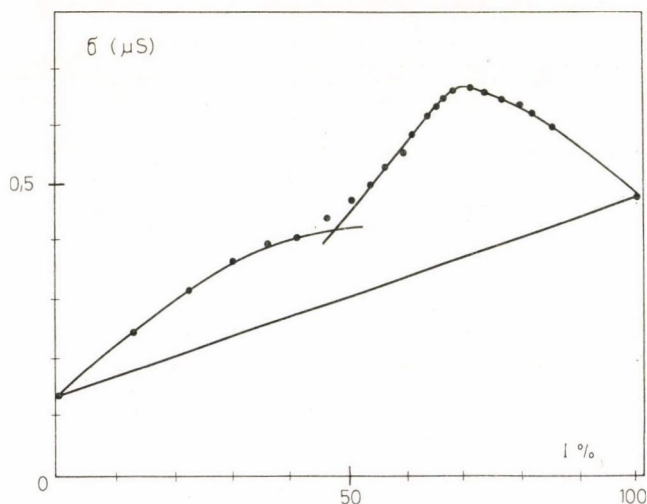
A  $\text{TTT} + \text{Br}_2$  reakcióval készült vegyület  
brómtartalmának változása átkristályosításkor  
([Br]/[TTT] arány, zárójelben a brómtartalom  
súly %-ban)

Oldatösszetétel	1x átkr.	2x átkr.
1:1	1,49 (25,34 %)	1,14 (20,57 %)
1,5:1	1,72 (28,06 %)	1,84 (29,49 %)
2:1	1,91 (30,29 %)	1,79 (28,91 %)

Az oldatfázisú komplexek létrejöttét a TTT-nek jóddal való konduktometriás titrálása útján vizsgáltuk. A titrálást diklórmetánban végeztük, a titrálási görbe a 18. ábrán látható. A titrálási reakció:



Két összetételnél kapunk vezetőképesség-maximumot, 1:1 és 1:2 TTT:I arány-nál. Ez azt jelenti, hogy az oldatban első lépésben TTT, illetve  $\text{TTTI}_2$  ionpárok képződnek, a jód tehát  $\text{TTT}^+$ , illetve  $\text{TTT}^{2+}$  ionná oxidálja a TTT molekulát, a kristály kialakulásakor azonban más kölcsönhatások is szerepet játszanak, egészen más összetételt eredményezve.



18. ábra. TTT diklórmetános oldatának jóddal való  
konduktometriás titrálási görbéje  
Kiindulási koncentráció:  $1,4 \cdot 10^{-6} \text{ mol/dm}^3$



### 3.2. A TTT-jód rendszerek röntgendiffrakciós vizsgálata

Mint már említettük, a kristályszerkezet meghatározását Guinier-kamrás porfelvételeink alapján nem tudtuk elvégezni. A felvételekből meghatározott karakterisztikus reflexiókat csak a már ismert szerkezetű fázisok azonosítására tudtuk felhasználni. Ezek: a TTT-jód 1:1 összetételű A és 2:3 összetételű B fázisa (*Buravov és munkatársai* [69] szerkezetvizsgálatából). Az utóbbi csoportnak sikerült egy harmadik, 1:3 körüli összetételű C fázist is izolálnia, de ennek röntgendiffrakciós adatait még nem közölték.

Az általunk előállított TTT szerkezete eltért a *Dideberg és Toussaint* [80] által közölttől (a TTT-nek ugyanis két polimorf módosulata van), ezért az összehasonlításhoz az ezen mért reflexiókat használtuk fel.

A karakterisztikus reflexiókat az ismert kristályszerkezetekre az 5. táblázat tartalmazza. Az általunk vizsgált különféle jód-, illetve brómtartalmú sók karakterisztikus reflexióit a 6. táblázatban foglaltuk össze.

A kis jódtartalmú minták lényegében szennyezett TTT-nek tekinthetők, itt a B fázis vonalai igen kis intenzitással jelentkeznek. 2:3 összetétel körül a B fázis, 1:2,5 [TTT]/[I] arány fölött a C fázis keletkezik. (Feltételezzük, hogy ez utóbbi azonos a szovjet kutatócsoport által találttal.) Az 1:1 összetételű anyag B fázis és TTT keveréke. Kismértékű egyéb szennyezést találtunk a  $\text{TTTI}_{0,16}$  és  $\text{TTTI}_{0,67}$  összetételű mintában.

Igen figyelemreméltó eredmény, hogy a  $\text{TTTI}_x\text{Br}_{3-x}$  sók izomorfak a B fázissal, és teljesen eltérnek a  $\text{TTTBr}$ -tól.

### 3.3. Oldatspektrumok

Az oldatspektrumokat metanolban, illetve diklórmetánban vettük fel. Az 1:1 vagy közel 1:1 összetételű sók metanolos spektruma teljesen megegyezik egymással és a Geiger által mért [24]  $\text{TTT}^+$  oldatspektrummal (11. ábra). Az a tény, hogy a metanolnál kevésbé poláros oldószerekben az anyagok fel sem oldódnak, arra utal, hogy az alapállapot a szilárd fázisban is nagyrészt ionos.

Több kísérleti eredmény utal arra, hogy gyökionok alacsony hőmérsékleten dimerizálódásra hajlamosak. Ebből a célból vizsgáltuk a TTT-acetát metanolos oldatban észlelt spektrumának hőmérsékletfüggését (19. ábra). A spektrum  $-60^\circ\text{C}$ -ig valóban teljesen át-

V. TÁBLÁZAT

A röntgendiffrakciós síkok távolsága  
TTT-jód A és B fázisban  
([69]-ből számolva)

A fázis		B fázis	
hkl	d(Å)	hkl	d(Å)
020	8,21	200	9,23
002	7,29	002	9,18
200	6,52	202	6,51
022	5,45	002	4,89
220	5,11	400	4,63
202	4,86	004	4,58
222	4,18	402	4,13
040	4,11	204	4,11
004	3,65	222	3,77
042	3,58	024	3,54
240	3,48	420	3,32
024	3,33	404	2,92
400	3,26	224	2,90
204	3,18	040	2,55
242	3,14	240	2,46
420	3,03	042	2,40
224	2,97	242	2,30
402	2,98	440	2,20
422	2,80	044	2,15
044	2,73	444	2,05
440	2,55		
244	2,52		
404	2,43		
442	2,41		
424	2,33		
444	2,09		

A fázis: a = 13,036 Å b = 16,435 Å  
c = 14,582 Å

B fázis: a = 18,464 Å b = 4,962 Å  
c = 18,353 Å



## VI. TÁBLÁZAT

Különböző jódtartalmú TTT— $I_n$  minták karakterisztikus reflexióiból számolt  $d$ -távolságok (Å) és hozzárendelésük az egyes fázisokhoz

TTT	TTT <sub>0,16</sub>	TTT <sub>1</sub>	TTT <sub>1,4</sub>	TTT <sub>1,8</sub>	TTT <sub>1,1Br0,5</sub>	TTT <sub>2,4</sub>	TTT <sub>2,8</sub>
10,05	9,18 B	9,21 B	9,16 B	9,16 B	9,16 B	5,74	5,74
8,04	8,04 TTT	8,04 TTT	6,51 B	6,51 B	6,51 B	4,75	4,75
7,58	7,58 TTT	7,58 TTT	4,89 B	4,89 B	4,89 B	4,63	4,63
3,90	6,51 B	6,51 B	4,63 B	4,63 B	4,63 B	4,29	4,29
3,88	4,89 B	4,63 B	4,58 B	4,58 B	4,58 B	3,98	3,98
3,42	4,63 B	4,58 B	4,13 B	4,13 B	4,13 B	3,84	3,84
3,31	4,58 B	4,13 B	4,11 B	4,11 B	4,11 B	3,66	3,66
2,98	4,13 B	4,11 B	3,77 B	3,77 B	3,77 B	3,36	3,36
2,83	4,11 B	3,90 TTT	3,54 B	3,54 B	3,54 B	3,16	3,16
2,38	3,90 TTT	3,77 B	3,32 B	3,32 B	3,32 B	3,04	3,04
2,26	3,77 B	3,54 B	2,92 B	2,92 B	2,92 B	2,97	2,97
1,98	3,54 B	3,42 TTT	2,90 B	2,90 B	2,90 B	2,87	2,87
1,83	3,42 TTT	3,31 TTT	2,46 B	2,46 B	2,46 B	2,84	2,84
1,69	3,31 TTT	3,32 B	2,40 B	2,40 B	2,40 B	2,74	2,74
1,66	3,32 B	2,92 B	2,30 B	2,30 B	2,30 B	2,60	2,60
	2,98 TTT	2,90 B	2,20 B	2,20 B	2,20 B	2,52	2,52
	2,92 B	2,55 B	2,15 B	2,15 B	2,15 B	2,36	2,36
	2,90 B	2,46 B	2,05 B	2,05 B	2,05 B	2,31	2,31
	2,83 TTT	2,26 TTT				2,26	2,26
	2,55 B	2,20 B				2,20	2,20
	2,46 B	2,15 B				2,18	2,18
	2,26 TTT	2,05 B				2,08	2,08
	2,20 B					1,99	1,99
	1,98 TTT					1,83	1,83
	1,83 TTT						
	1,69 TTT						
	1,66 TTT						
	TTT + B	TTT + B	B	B	B	C	C

## VII. TÁBLÁZAT

A (TTT<sup>+</sup>)<sub>2</sub> dimer  
abszorpciók spektruma

$\nu^*$ (10 <sup>3</sup> cm <sup>-1</sup> )	$\varepsilon$ (l/mol cm)
5,5	3600
18,2	3600
21,5	5800
25,0	5000

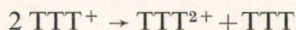
## VIII. TÁBLÁZAT

$I_2$  és  $I_3^-$  abszorpciók  
spektruma [72]

	$\nu^*$ (10 <sup>3</sup> cm <sup>-1</sup> )	$\varepsilon$ (l/mol cm)
$I_2$	19,5	1 000
	26,0	10 000
$I_3^-$	17,0	250
	22,0	3 000
	27,0	25 250
	34,5	43 320



alakult, itt azonban a  $7000\text{ cm}^{-1}$  alatti tartományt a metanol erős saját abszorpciója elfedte. A TTT-acetát tömény vizes oldata azonban már szobahőmérsékleten a dimer spektrumát mutatja, és látható egy új csúcs  $5500\text{ cm}^{-1}$ -nél is (20. ábra). A többi hasonló vizsgálat analógiájára [25, 81] ez a csúcs a dimeren belüli töltésátviteli gerjesztéshez rendelhető, azaz a

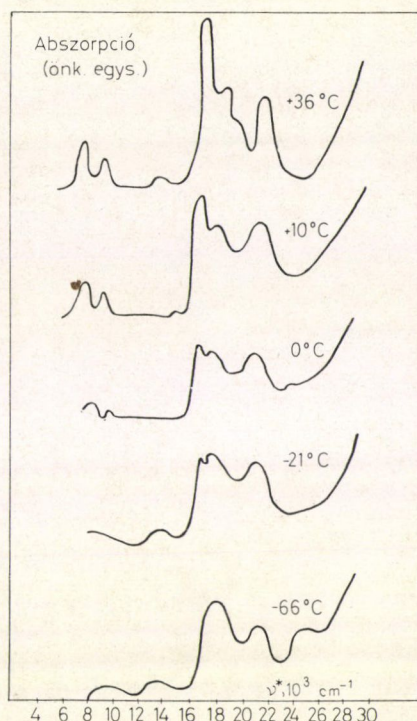


folyamathoz.

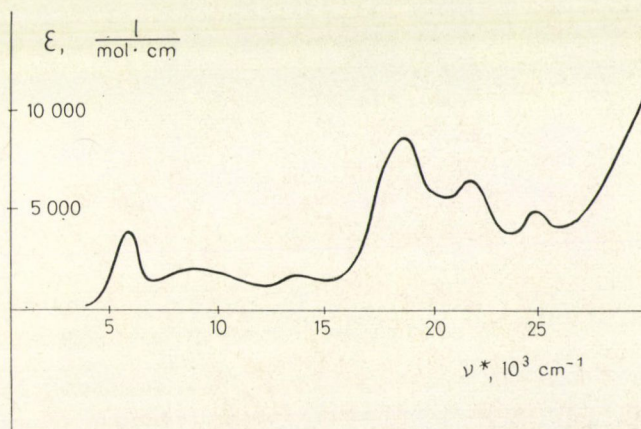
A dimer elnyelési sávjainak helyét és hozzávetőleges abszorpciós koefficiensét a 7. táblázat tartalmazza.

A TTT-jód rendszer különböző fázisainak oldatspektrumait a 21. ábrán ábrázoltuk. Itt várható, hogy az akceptor valamilyen oxidációfokú fajtájának spektruma is megjelenik. A jód és a trijodid elnyelése a 8. táblázatban található. Az egyes csúcsok ezeknek alapján a 9. táblázat szerint rendelhetők a különböző molekula-, illetve ionfajtákhoz.

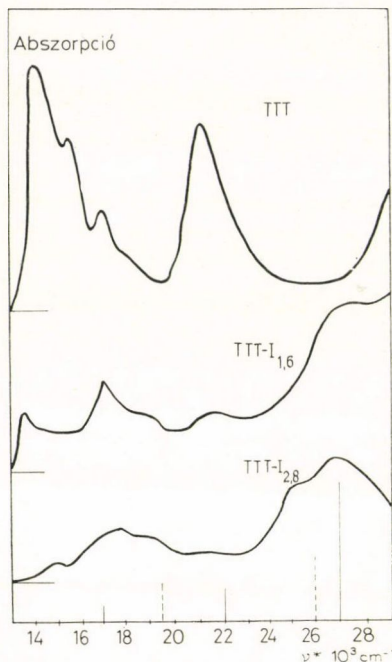
Az ábrákból és a táblázatból kitűnik, hogy a kis jódtartalmú minták az oldatban semleges TTT-re és jódra disszociálnak, a jód azonban a kis intenzitású sávok miatt nem mutatható ki. Az 1:1 összetételű, kevert fázisú minta spektruma is a TTT-ével egyezik meg, ennek oka a TTT fázis lényegesen jobb oldhatósága. A B fázisú minták oldatában már a  $\text{TTT}^+$ -ra és  $\text{I}_3^-$ -ra jellemző csúcsokat is megtaláljuk.



19. ábra. TTT-acetát metanolos oldata abszorpciós spektrumának hőmérsékletfüggése



20. ábra. TTT-acetát vizes oldatának spektruma (szobahőmérsékleten)

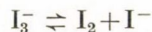
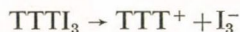


21. ábra. TTT,  $\text{TTTI}_{1,6}$  és  $\text{TTTI}_{2,8}$  diklórmétanos oldatának spektruma. A függőleges folytonos vonalak a  $\text{I}_2$ , a szaggatott vonalak a  $\text{I}_3^-$  elnyeléseit jelzik. A vonalak magassága az intenzitással arányos

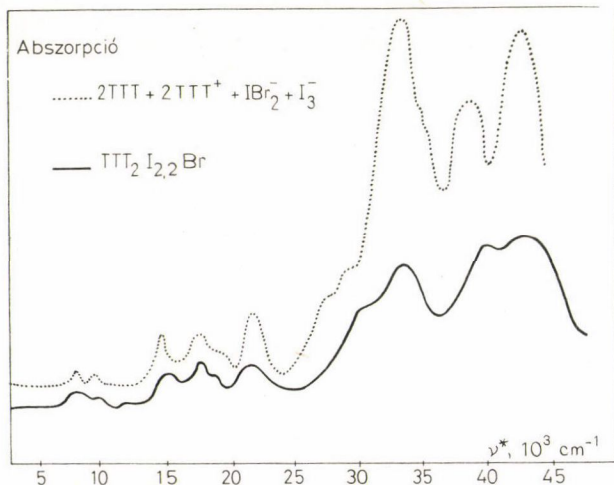
A TTT jelenlétét továbbra is fel kell tételeznünk, mert a  $14\,500\text{ cm}^{-1}$ -nél jelentkező csúcs intenzitása csak így magyarázható. A spektrum alapján a következő disszociációs folyamat látszik valószínűnek:



A nagy jódtartalmú, C fázisú mintákban a TTT elnyelési sávjai már nem ismerhetők fel, de a trijodid mellett a jód elnyelése is megjelennek. Ez a következő disszociációs folyamatokra utal:



A  $\text{TTT}_2\text{I}_x\text{Br}_{3-x}$  mindkét alakjának spektruma a B fázisára hasonlít, azaz TTT-re és  $\text{TTT}^+$ -ra jellemző csúcsok egyaránt előfordulnak. A trihalogenidek, illetve halogénmolekulák vagy ionok azonosítása a jelenleginél lényegesen érzékenyebb műszerezettség igényelne, hiszen  $\text{I}_3^-$ ,  $\text{Br}_3^-$ ,  $\text{I}_2\text{Br}^-$ ,  $\text{IBr}_2^-$  ionok egyaránt előfordulhatnak az oldatban. Mint a 22. ábrán is látható, a következő reakciók feltételezésével (ezeknek egyensúlya mind jobbra van eltolva) a  $\text{TTT}_2\text{I}_{2,2}\text{Br}$  oldatspektruma kvalitatíve magya-



22. ábra. A  $\text{TTT}_2\text{I}_{2,2}\text{Br}$  diklórmétanos oldatspektrumának összehasonlítása a  $2\text{TTT} + 2\text{TTT}^+ + \text{IBr}_2^- + \text{I}_3^-$  spektrumösszeggel

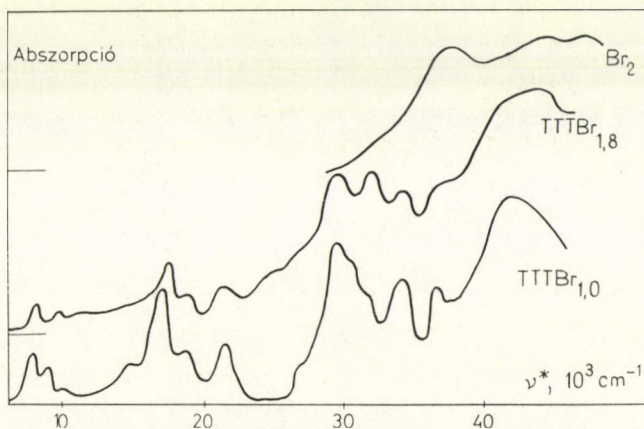
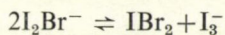
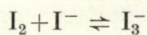
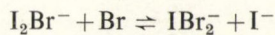
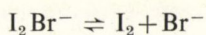


## IX. TÁBLÁZAT

Különböző TTT-jód fázisok oldatspektrumai

	$\nu^*$ ( $10^3 \text{ cm}^{-1}$ )		Összetétel
TTTI <sub>0,16</sub>	14 500	TTT	TTT (+I <sub>2</sub> )
	15 000	TTT	
	17 000	TTT	
	21 500	TTT	
TTTI <sub>1,6</sub>	8 200	TTT <sup>+</sup>	TTT + TTT <sup>+</sup> + I <sub>3</sub> <sup>-</sup>
	10 000	TTT <sup>+</sup>	
	14 500	TTT (TTT <sup>+</sup> )	
	17 000	TTT <sup>+</sup> (TTT) (I <sub>3</sub> <sup>-</sup> )	
	22 000	TTT, TTT <sup>+</sup>	
	27 000	I <sub>3</sub> <sup>-</sup>	
TTTI <sub>2,8</sub>	8 200	TTT <sup>+</sup>	TTT <sup>+</sup> + I <sub>3</sub> <sup>-</sup> + I <sub>2</sub>
	10 000	TTT <sup>+</sup>	
	15 000	TTT <sup>+</sup> (TTT)	
	17 000	TTT <sup>+</sup>	
	19 500	I <sub>2</sub>	
	26 000	I <sub>2</sub>	
	27 000	I <sub>3</sub> <sup>-</sup>	

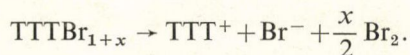
rázható:



23. ábra. Különböző brómtartalmú TTT + Br<sub>2</sub> reakcióval készült TTTBr minták és az elemi bróm abszorpciós spektruma (oldószer: diklórmétán)

Az oldatspektrum annyit mindenképpen bizonyít, hogy a TTT—I—Br rendszerben is töltésátvitel történik a TTT-ről a halogénekre.

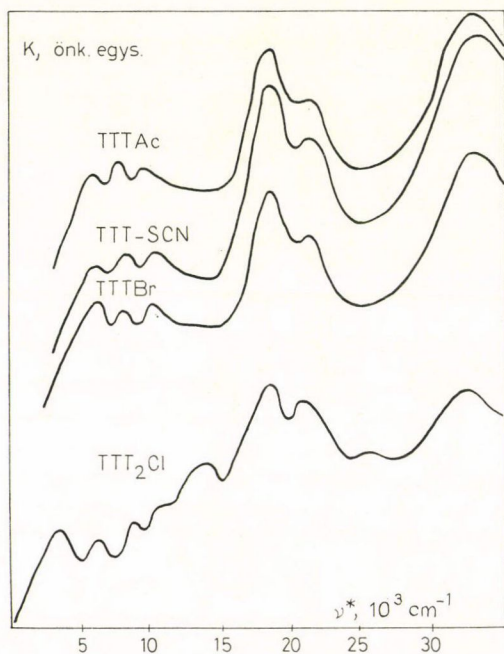
A különböző összetételű TTTBr minták oldatspektrumának (23. ábra) közös vonása, hogy csak TTT<sup>+</sup> csúcsok találhatók bennük, TTT-re jellemzők nem. A növekvő brómtartalommal növekszik a Br<sub>2</sub> sáv intenzitása is. Ennek alapján a disszociációs folyamat:



A szilárd állapotú minták — különösen az utóbbi esetekben — nem feltétlenül tartalmazzák az oldatban megtalálható molekula- vagy ionfajtákat, a fent leírt arányban. Jó példa erre a TTT-jód rendszerek különböző oldószerekben felvett spektruma is. Acetonitrilben, ami a trijodidképződésnek nem kedvez és erősebben ionizáló a diklórmétánnál, csak a TTT<sup>+</sup> ion spektruma jelentkezik már 1:1 összetételnél is. A molekulák állapotát a kristályokban csak szilárd fázisú mérésekkel határozhatjuk meg.

### 3.4. Elektrongerjesztési spektrumok szilárd fázisban

A spektrumokat részben diffúz reflexiós módszerrel BaSO<sub>4</sub>-tal hígítva vettük fel (10 000—36 000 cm<sup>-1</sup>), részben KBr pasztillában, transzmisszióval (800—



24. ábra. TTTAc, TTTSCN, TTTBr és TTT<sub>2</sub>Cl szilárd porspektruma (diffúz reflexiós és KBr pasztillában felvéve)

15 000 cm<sup>-1</sup>). A TTTAc, TTTSCN, TTTBr és TTT<sub>2</sub>Cl spektruma a 24. ábrán látható. A TTT, továbbá a három TTT—I fázis és a TTT<sub>2</sub>I<sub>2,2</sub>Br spektrumát a 25. ábra mutatja.

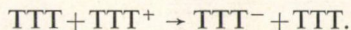
Az 1:1 vagy közel 1:1 sók teljesen egyforma spektrumot adnak, amelyben csaknem minden sáv megfeleltethető a TTT<sup>+</sup> ion valamelyik oldatbeli elnyelési csúcsának (26. ábra). Az egyetlen, ezenkívül jelentkező elnyelés (6000 cm<sup>-1</sup>) egybeesik a dimer töltésátviteli sávjával. Ennek alapján azt mondhatjuk, hogy a kristályban a közvetlen szomszédok nem perturbálják egymás elektronrendszerét annyira, hogy szigorúan vett dimerek keletkezzenek, de a távolság valószínűleg elég kicsi ahhoz, hogy a dimerben is előforduló töltésátvitel gerjeszthető legyen. (Az anyagok mikrokristályos volta miatt a kristályszerkezetet illetően csak találgatni tudunk. A töltésátviteli sáv megjelenése közvetve a lánc-felépí-



tést valószínűsíti ezekben az anyagokban is.)

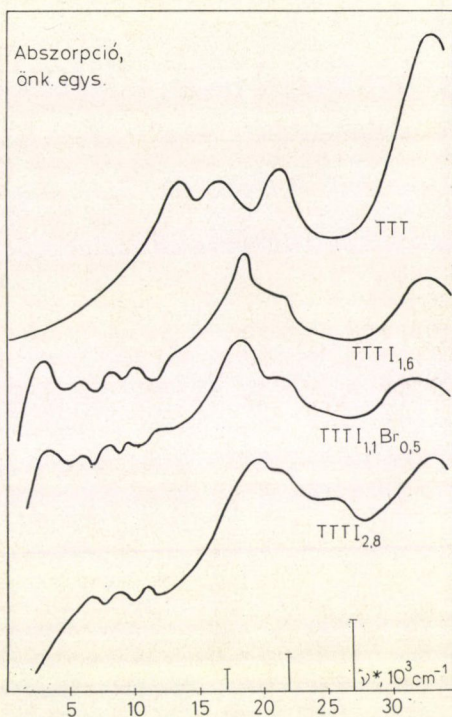
A  $\text{TTT}_2\text{Cl}$ -ban mind az 1:1 sókra, mind a TTT-re jellemző csúcsokat megtaláljuk (27. ábra). Ezenkívül nemcsak a  $6000\text{ cm}^{-1}$ -es, hanem a  $25\,000\text{ cm}^{-1}$ -es dimercsúcs is megjelenik. Elképzelhető, hogy itt egy erősen dimerizált kristályszerkezet fordul elő. Hasonlóak a tapasztalatok egyes közepesen vezető TCNQ-sóknál [33].

Megjelenik ezenkívül  $3000\text{ cm}^{-1}$ -es maximummal egy széles abszorpciós sáv az infravörös tartományban, a rezgési szerkezetre szuperponálódva. Ezt, tekintetbe véve, hogy csak kevert vegyértékű donort tartalmazó vegyületekben fordul elő, és alkalmazva a TCNQ-sókra elfogadott értelmezést, [14] a következő átmenethez rendelhetjük:

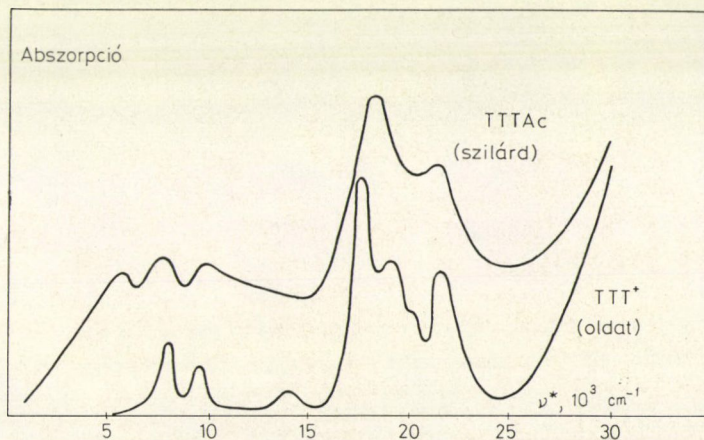


A TTT-jód rendszerekben a szilárd fázisú spektrumokból (25. ábra), összehangban a röntgendiffrakciós és dikiórmetánban felvett oldatspektroszkópiai vizsgálatokkal, a következőket láthatjuk:

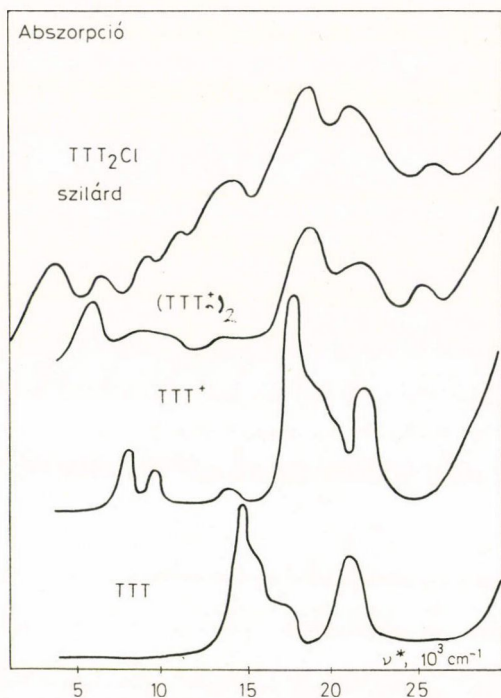
A kis jódtartalmú minták a TTT spektrumát mutatják, ez a fázis jóddal szeny-



25. ábra. TTT és a jódot tartalmazó fázisok szilárd porspektruma (diffúz reflexióval és KBr pasztillában felvéve). A függőleges vonalak a  $I_2$  diffúz reflexiós spektrumának csúcsait [72] jelenítik, intenzitásarányosan.

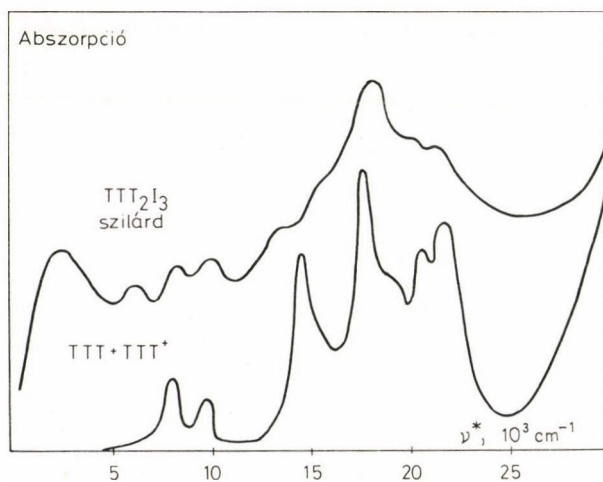


26. ábra. A szilárd TTT-acetát és a  $\text{TTT}^+$ (oldat) spektrumának összehasonlítása



27. ábra. A  $\text{TTT}_2\text{Cl}$  szilárd spektrumának összehasonlítása a  $\text{TTT}$ ,  $\text{TTT}^+$  és  $(\text{TTT}^+)_2$  oldatspektrumával

nyezett  $\text{TTT}$ -nek felel meg. A B fázisban a spektrum a  $\text{TTT}_2\text{Cl}$ -éhoz hasonlóan írható le, de a dimer  $25\,000\text{ cm}^{-1}$ -es csúcsa nélkül (28. ábra). Ugyanez vonatkozik a  $\text{TTT}_2\text{I}_x\text{Br}_{3-x}$ -ra is. A C fázisban mind a  $\text{TTT}^+$ -ra, mind a  $\text{I}_3^-$ -ra jellemző elnyelések megerősödnek. (A  $\text{I}_3^-$  diffúz reflexiós spektrumának jellemző csúcsait a 25. ábra alján függőleges vonalakkal jelöltük [72].) Az infravörös tartományban az elektrongerjesztési csúcs a B fázisú  $\text{TTT}$ -jód és a  $\text{TTT}-\text{I}-\text{Br}$  esetében mindig megjelenik,  $2000\text{ cm}^{-1}$  körüli maximummal. A C fázis esetében ez csak akkor figyelhető meg, ha a jódtartalom az  $1:3 [\text{TTT}]/[\text{I}]$  aránynál jóval kisebb. Ennek alapján azt mondhatjuk, hogy a C fázis  $1:3$  összetételű sztöchiometrikus alakja a  $\text{TTT}^+\text{I}_3^-$  szerkezetnek felel meg, ennél kisebb jódtartalom esetén azonban még látható a kevert vegyértékállapotra utaló elnyelés. A kevesebb jód tehát nem jodidionokat képezve épül be a kristályba, hanem mindenképpen trijodid formában.



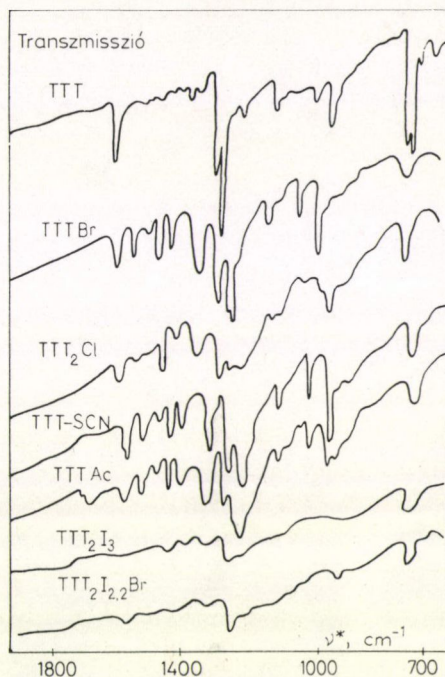
28. ábra. A  $\text{TTT}_2\text{I}_3$  szilárd spektrumának összehasonlítása a  $\text{TTT}$  és  $\text{TTT}^+$  oldatspektrumának összegével



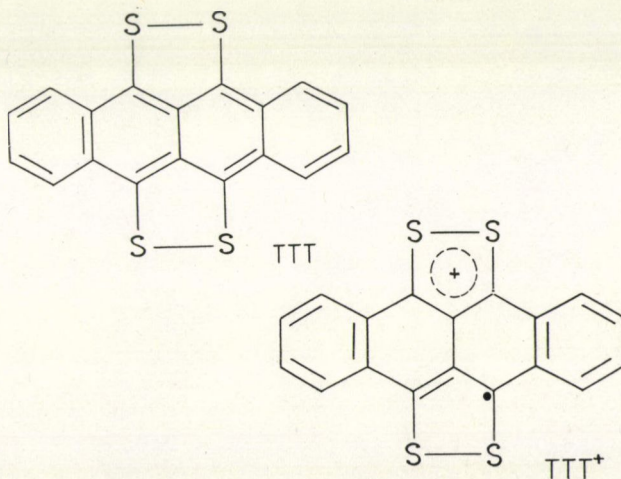
### 3.5. Rezgési spektrumok

A TTT és a TTT sók rezgési spektruma a 29. ábrán látható. A spektrumok alapvonala minden esetben erős fényszórásra utal, ezt a szemcseméret, illetve a hígítás változtatásával sem sikerült kiküszöbölni. Ezenkívül a kevert vegyértékállapotú TTT-t tartalmazó sókban látható az előző fejezetben tárgyalt töltésátviteli sáv is, ezekben az esetekben az alapvonal jelentősen eltér még a hullámszámmal való lineáris változástól is, egy abszorpciós maximum figyelhető meg rajta, és a rezgési csúcsok elmosódottá válnak.

Mivel az 1:1 TTT-sók rezgési spektruma teljesen egyforma, *Perez-Albuerna* [63] nyomán ezt a  $\text{TTT}^+$  ionhoz rendelhetjük. Látható, hogy a semleges TTT és az ion spektrumában viszonylag kevés helyen, a vázrezgések tartományában van eltérés (10. táblázat). Ez érthető is, hiszen az ionizáció elsősorban a ként tartalmazó gyűrűn okoz elektronszerkezeti változást [12] (30. ábra), a S—S és C—S kötések rezgései pedig igen gyengék és nem is azonosíthatók egyértelműen. Az észlelt változások alapján azonban megkísérrelhetjük a vegyértékállapotok legalább kvalitatív meghatározását. Ehhez fel kell tételeznünk, hogy a kristályszerkezet minden anyagban azonos szimmetriájú, de



29. ábra. TTT-sók rezgési spektruma



30. ábra. TTT és  $\text{TTT}^+$  elektronszerkezete

## X. TÁBLÁZAT

TTT és TTT<sup>+</sup> infravörös csúcsai (cm<sup>-1</sup>)

TTT		TTT <sup>+</sup>
1612 m	C <sub>ar</sub> —C <sub>ar</sub>	1599 m
1522 w	C <sub>ar</sub> —H	1550 m
	(5 tagú, 2 heteroatomos gyűrű)	1504 w
		1463 s
		1432 m
		1361 s
1319 s		1313 s
1305 vs	kondenzált aromás	
1248 w	gyűrű vázrezgései	1286 vs
		1274 vs
1148 w		1163 m
1010 w		1058 s
968 m		998 vs
		972 m
742 s	C <sub>ar</sub> —H	751 m
733 vs		
715 w		

Intenzitásjelölések: vs igen erős, s erős, m közepes, w gyenge.

legalábbis a TTT szimmetriája azonos módon változik mindenütt az izolált molekulához képest. Mivel nagy planáris molekuláról van szó, és az egyes 1:1 sók spektruma igen hasonló, ez a feltevés elfogadható.

A 31. ábrán a spektrum 1000 cm<sup>-1</sup> körüli részét ábrázoltuk TTT-jód sókban, a jódtartalom függvényében. A TTT<sup>+</sup> tartalom növekedésével jól látható az intenzitásváltozás. Az I(970)/I(1000) intenzitásarányt különböző anyagokra a 11. táblázat tartalmazza.

## XI. TÁBLÁZAT

Az I(970)/I(1000) arány  
különböző TTT sókban

	I(970)/I(1000)
TTT	3,0
TTTI <sub>1,4</sub>	1,5
TTTI <sub>1,6</sub>	1,4
TTTI <sub>2,4</sub>	1,0
TTTI <sub>2,8</sub>	0,67
TTTI <sub>1,1</sub> Br <sub>0,5</sub>	1,6
TTTBr	0,5
TTT <sub>2</sub> Cl	1,5
TTTSCN	0,6
TTTAc	0,5

A táblázatból kiolvasható, hogy a vizsgált anyagok lényegében három csoportra oszthatók:

- TTTSCN, TTTAc, TTTBr, TTTI<sub>2,8</sub>,
- TTT<sub>2</sub>Cl, TTT<sub>2</sub>I<sub>3-x</sub>, TTT<sub>2</sub>I<sub>x</sub>Br<sub>3-x</sub>,
- TTT.

Az első csoport csak TTT<sup>+</sup> iont tartalmaz, a másodikban a TTT:TTT<sup>+</sup> arány ~1:1 (feltételezve, hogy a TTT<sub>2</sub>Cl-ban ez így van, a többire is ez a következtetés adódik). Az első és második csoport között helyezkedik el a TTTI<sub>2,4</sub>, amelyben valószínűleg mindkét oxidációs állapot előfordul, de az ion koncentrációja nagyobb.

A TTT és Br<sub>2</sub> reakciójával készült TTTBr volt az egyetlen anyag, amelynek rezgési spek-



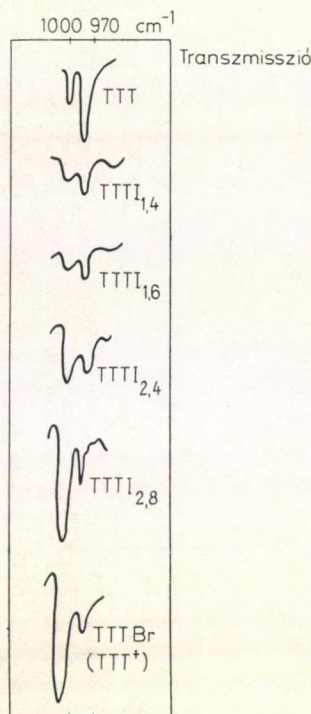
truma lényegesen eltért a többitől. A különbség első-sorban az intenzitásviszonyokban jelentkezik, ami arra utal, hogy ebben az anyagban a kristálybeli szimmetria eltér a többi anyagétól (32. ábra).

### 3.6. Kristályenergia-számolások

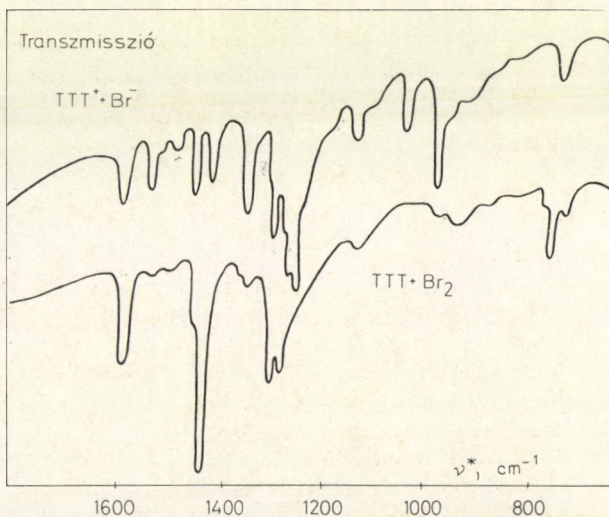
Madelung-energia számolásokat a  $\text{TTT}_2\text{I}_3$  sztöchiometrikus fázisára vonatkozóan végeztünk. A számolásokhoz a Carsky [90] által PPP módszerrel kapott töltéseloszlásokat használtuk fel (33. ábra).

A Smith és Luss [70] által meghatározott kristályszerkezet világosan mutatja  $\text{I}_3^-$  ionok jelenlétét az akceptorláncon, ezért a jódláncon az izolált  $\text{I}_3^-$ -nak megfelelő töltéseloszlással számoltunk (a középső jódatomon 0, a két szélső mindegyikén  $-0,5 |e|$  töltés van). Pontosabb számolások a kristályrács hatásának figyelembevételével [82] a  $-0,45$ ,  $-0,1$ ,  $-0,45$  töltéseloszlásra vezetnek, mivel azonban a modellszámolások célja különböző geometriai elrendezések összehasonlítása volt azonos töltéseloszlás mellett, ez a kis pontatlanság elhanyagolható.

Az alapul vett kristályszerkezet [70] megegyezik a Buravov és munkatársai [69] által találttal, ami a 12. ábrán látható. A szerzők által vizsgált minta nem volt teljesen sztöchiometrikus (összegképlete:  $\text{TTT}_2\text{I}_{3,28}$ ), tehát a két lánc periódusa nem volt teljesen azonos.



31. ábra. TTT-jód fázisok infravörös csúcsai  $1000\text{ cm}^{-1}$  körül



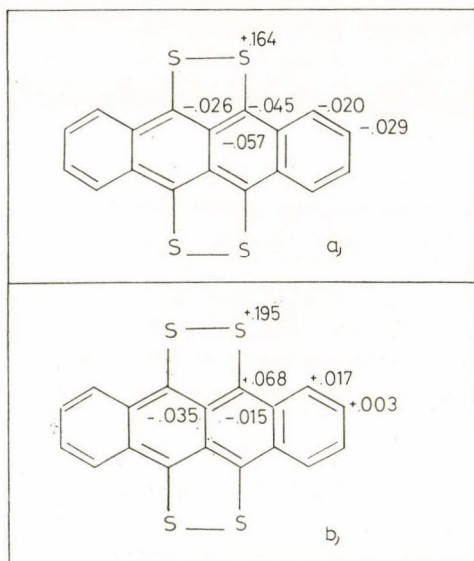
32. ábra



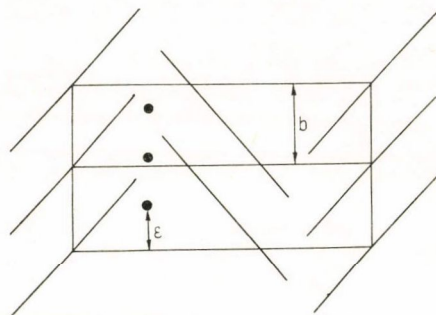
Mivel ennek figyelembevétele a translációs szimmetriát nagymértékben kihasználó számítási eljárásban megoldhatatlan problémát jelentett volna, a  $b_1 = 1,92b_{\text{TTT}}$  arány helyett a  $b_1 = 2b_{\text{TTT}}$  aránnyal dolgoztunk, a különbséget arányosan elosztva az egyes jód—jód távolságok között.

Az idézett krisztallográfusok és mások [66, 83, 84] azt találták, hogy a jódláncban a trijodid-ionokra a nagyfokú rendezetlenség a jellemző, ezért célszerűnek tűnt megvizsgálni, hogy a trijodidok helyének változtatásával a Madelung-energia hogyan változik. Ebből a célból bevezettük az  $\varepsilon$  paramétert (34. ábra), azaz a  $I_3^-$  ion legszélső atomjának  $y$  koordinátáját az elemi cella  $b$  tengelyéhez viszonyítva. A TTT töltéseloszlását az ún. „általánosított Wigner kristálynak” megfelelően vettük fel, azaz a kristályban semleges TTT molekulák váltakoznak  $\text{TTT}^+$  ionokkal, mégpedig úgy, hogy az ionok minden szomszédja a tengelyek mentén semleges és megfordítva.

Emiatt a töltésszimmetria miatt az  $\varepsilon$  paramétert a 0—2 tartományban kellett változtatnunk, azaz a Smith és Luss által a TTT alrácsra megállapított elemi cella az  $y$  irányban megduplázódik.



33. ábra. a) TTT, b)  $\text{TTT}^+$  töltéseloszlása [90]



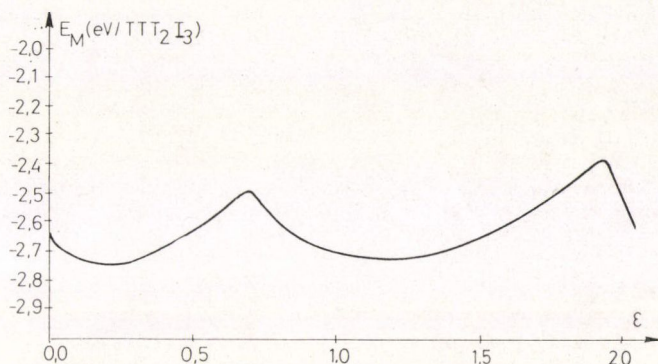
34. ábra. A számítási eljárás  $\varepsilon$  paramétere

A számítási eljárást és az előzetes kipróbálást a Függelékben ismertetjük. Az  $\varepsilon$  paramétert 0,1 léptékkel, diszkrétan változtattuk, és minden ilyen esetre — a többi paramétert szigorúan azonosan tartva — kiszámoltuk a Madelung-energiát, kb. 30 Å sugarú környezetet figyelembe véve, így a kristály többi részének elhanyagolásából eredő hiba max. 0,5%.

A Madelung-energiát az  $\varepsilon$  paraméter függvényében ábrázoltuk a 35. ábrán. A görbének két minimuma van:  $\varepsilon=0,2$  és  $\varepsilon=1,2$ -nél, ami megegyezik a röntgendiffrakciós vizsgálattal talált helyzettel. Az  $\varepsilon=0,7$ -nél levő maximum és a minimum különbsége 0,6 eV/ $\text{TTT}_2\text{I}_3$ . A minimum ugyanakkor elég lapos ahhoz, hogy megengedje a trijodid-ionok bizonyos mértékű szabad „csúszását” a rácsban. Ezzel magyarázható, hogy a kristály magas hőmérsékleten rendezetlen formában tartalmazza a  $I_3^-$  ionokat, és a szerkezet alacsony hőmérsékleten rendeződik. Még egy



mérési eredmény utal a viszonylag könnyű rendeződésre: a  $\text{TTT}_2\text{I}_{3,2}$  ellenállásának hőmérsékletfüggése  $100^\circ\text{C}$ -on való hőkezelés hatására úgy változik, hogy jobban hasonlít a mások által igen lassú hűtéssel előállított mintákéra [68]. Valószínű, hogy a kristályba több-kevesebb véletlenszerűséggel beépült jód a hőkezelés során rendeződik.



35. ábra. A  $\text{TTT}_2\text{I}_3$  Madelung-energiája a jódlánc elhelyezkedésének függvényében. Az  $\epsilon$  paramétert a  $b$  rácsállandó egységeiben adtuk meg.

Ennél a modellszámolásnál az elemi cellának mind a négy jódláncát „szinkronban” mozgattuk, azaz a megfelelő jódatomok egy síkban voltak. Felmerült a gondolat, hogy ha a legközelebbi jódlánckok egymás közti taszítása jelentős, akkor a jódlánckok eltolásával egymáshoz képest egy alacsonyabb energiájú állapothoz jutunk. Két esetre végeztünk számolásokat. Az első esetben egymáshoz közeli energiájú állapotokat „raktunk össze”: két láncban  $\epsilon=0,2$ , a másik kettőben  $\epsilon=1,2$  értékkel (izolált láncokra így lenne a legkisebb a taszítás). A kapott  $E_M = -2,74$  eV megegyezik a kiindulási állapotok  $E_M$  értékeivel külön-külön. ( $\epsilon=0,2$ -nél  $E_M = -2,75$  eV,  $\epsilon=1,2$ -nél  $E_M = -2,74$  eV.)

A második esetben,  $\epsilon=0,9$  geometriájú kristályból kiindulva, egy láncot „kiemeltünk”  $\epsilon=1,9$ -ig. Itt az energia, érdekes módon, mindkét kiindulási konfigurációhoz képest csökkent, de az  $\epsilon=0,2$ -nél kapott minimumnál nem volt kisebb. Mindebből azt a következtetést vontuk le, hogy a jódlánckok közti kölcsönhatás ugyan játszik némi szerepet a kristály elektrosztatikus energiájában, de semmiképpen sem domináns a TTT-lánc—jódlánc kölcsönhatáshoz képest. Más szóval, elképzelhető, még olyan konfiguráció, amely az  $\epsilon=0,2$ -nél kapott energiaminimumnál is kisebb energiájú, de a különbség nem lehet jelentős. (A teljes, sokparaméteres minimalizálásra a korlátozott számítógép-idő miatt nem volt lehetőség.)

Más hatások azonban még eredményezhetnek további stabilitásnövekedést. Ilyen lehet mindenekelőtt az elektron-delokalizációból eredő kinetikus energijárulék. Ha az elektronok teljesen delokalizáltak, azaz minden TTT rácspont egyforma, azt formálisan úgy tekinthetjük, mintha minden rácsponton  $+1/2$  töltés volna. Az ehhez tartozó töltéseloszlást lineáris interpolációval számoltuk a TTT és  $\text{TTT}^+$  töltéseloszlásából. Eredményül ( $\epsilon=1,2$ -nél)  $-1,1$  eV/ $\text{TTT}_2\text{I}_3$ -at kaptunk. A termoelektro-



motoros erő és mágneses szuszceptibilitás méréseiből meghatározott  $-0,3$  eV kinetikus energia nem fedezi a mintegy  $1,6$  eV-nyi növekedést a megnövekedett Coulomb-taszítás hatására, tehát a teljesen delokalizált elektronrendszer nem stabilizálódik.

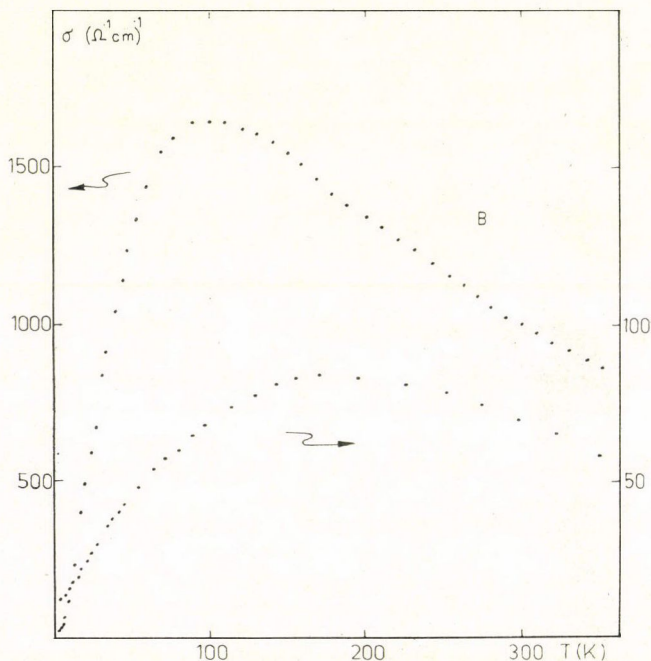
Vizsgáltuk még a jódláncon belüli töltéseloszlás hatását a stabilitásra. Ha a töltés egyformán oszlik el a három jódatomon ( $\varepsilon=1,2$  értéknél) a Madelung-energia  $0,6$  eV/ $\text{TTT}_2\text{I}_3$ -mal nő ( $E_M=-2,12$  eV).

A legstabilabb konfiguráció ezek szerint a  $\text{TTT}^+\text{TTTI}_3^-$  képlettel leírható elektronszerkezetű, az  $\varepsilon=0,2$  vagy  $\varepsilon=1,2$  ( $y=0,2$   $0,8$ ,  $1,4 \times b$ , illetve  $y=1,2$   $1,8$ ,  $0,4b$ ) trijodid helyzetű elrendezés. Ennek Madelung-energiája  $E_M=-2,74$  eV/ $\text{TTT}_2\text{I}_3$ . Ez az eredmény teljes összhangban van a röntgenszerkezet-vizsgálattal és az optikai spektrumokból (3.3, 3.4, 3.5 fejezet) kapott kémiai szerkezettel.

### 3.7. Elektromos vezetőképesség

A TTT-sók közül csak a TTT-jód B és C fázisa, valamint a TTT—I—Br rendszerek kristályainak mérete volt elegendő egyenáramú ellenállásméréshez ( $1 \times 0,1 \times 0,01$  mm<sup>3</sup>). A mért ellenállás-hőmérséklet görbéket a legjobban vezető irányban a 36. és 37. ábra mutatja.

Mindegyik anyagra a jól vezető TCNQ-sóknál is megfigyelt vezetőképesség a jellemző, egy vezetőképességi maximummal. A maximumhőmérséklet fölött a vezető-



36. ábra. A TTT-jód B és C fázis vezetőképességének hőmérsékletfüggése a jól vezető irányban. Mihály György mérése



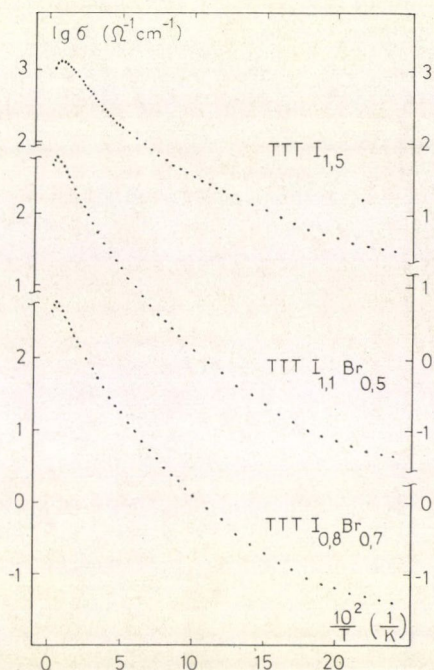
képesség változása T-vel fémes jellegű, azaz növekvő hőmérséklettel csökken. A maximum alatt a változás nem tisztán félvezetőjellegű, azaz nem írható le egy vagy két exponenciális szakasszal.

A  $\text{TTT}_2\text{I}_3$ -hoz közeli összetételű B fázis rendelkezik a legmagasabb szobahőmérsékleti vezetőképességgel,  $\sigma_{RT} \sim 1000 \Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$ . Ez nemcsak az itt szereplő TTT-sók, hanem a többi szerves vezető anyag között is az egyik legnagyobb érték. Ezenkívül a TTT-jód B fázisa mutatja a legkisebb csökkenést a vezetőképességben a maximumhőmérséklet és  $4^\circ\text{K}$  között. Anizotrópiája kisebb, mint a TCNQ-sóké,

$$\frac{\sigma_{\parallel}}{\sigma_{\perp}} = 50.$$

A B fázissal izomorf  $\text{TTT}_2\text{I}_x\text{Br}_{3-x}$  rendszerek vezetőképessége igen hasonló a  $\text{TTT}_2\text{I}_3$ -éhoz, alacsony hőmérsékleten a csökkenés erősebb, azaz a vezetőképesség itt már inkább félvezető jellegű.

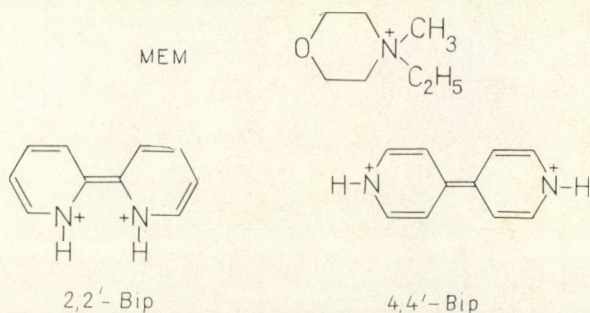
A  $\text{TTTI}_3$  körüli összetételű C fázis is a jellegzetes maximumgörbét mutatja, vezetőképessége azonban egy 20-as faktorral kisebb a B fázisénál.



37. ábra. TTT—I—Br fázisok vezetőképességének hőmérsékletfüggése a jól vezető irányban. Mihály György mérése

### 3.8. Kiegészítő mérések TCNQ-sókon

Az optikai gerjesztések és a vezetőképesség kapcsolatáról a TTT-sók vizsgálata alapján — egykristály-vezetőképességi adatok hiányában — igen keveset tudunk meg. Ezért végeztünk optikai méréseket néhány olyan TCNQ-són, amelyeken a vezetőképesség a hőmérséklet függvényében, egykristályokon mérve, ismert volt.



38. ábra. Metil-etil-morfolinium, 2-2' és 4-4' bipiridilium ionok szerkezeti képlete



A vizsgált vegyületek  $D(\text{TCNQ})_n$  összetételűek, ahol a  $D$  donorok a következők:

N-metil-piridinium (NMePy)	$n=2$
metil-etil-morfolinium (MEM)	$n=2$ (38. ábra)
2-2'bipiridilium (2-2'Bip)	$n=4$ (38. ábra)
4-4'bipiridilium (4-4'Bip)	$n=4$ (38. ábra)
kinolinium (Qn)	$n=2$

(A bipiridilium-sókban a donor mindkét nitrogénje protonált, így egy donoratomra jut két akceptormolekula.)

A vegyületek elektromos vezetőképessége jelentős különbségeket mutat. *Grüner György és munkatársai* [17] kimutatták, hogy a vezetőképesség jellegét a donorlánc-on kialakuló rendezetlenség mértéke határozza meg, ami szoros összefüggésben van a donorok dipólmomentumával. Anélkül, hogy ezt az elméletet ismertetnénk, a következőkben foglalhatjuk össze az egyes csoportok egy-egy tipikus anyagának jellemzőit:

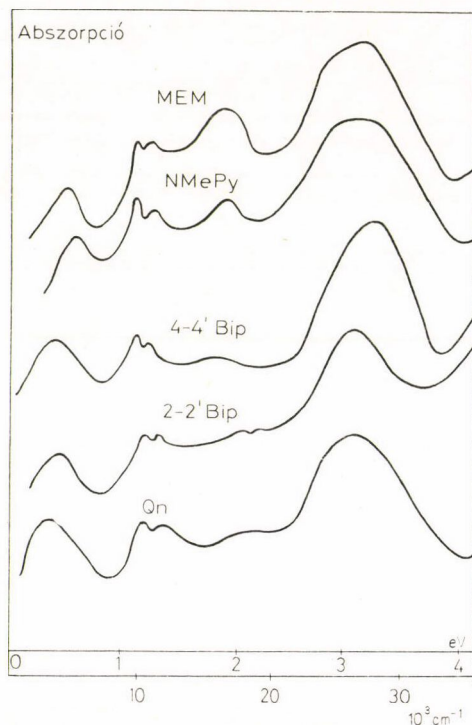
Az NMePy(TCNQ)<sub>2</sub> és MEM(TCNQ)<sub>2</sub> rosszul vezető, félvezető jellegű vegyület, aktiválási energiájuk 0,3–0,4 eV. A MEM(TCNQ)<sub>2</sub> kristályszerkezete ismert, szobahőmérsékleten erősen dimerizált.

A Qn(TCNQ)<sub>2</sub> és a 2-2'Bip(TCNQ)<sub>4</sub> jól vezető anyagok (szobahőmérsékleten  $\sigma \sim 100 \Omega \text{ cm}^{-1}$ ). A vezetőképesség hőmérsékletfüggése a TTT<sub>2</sub>I<sub>3</sub>-éhoz hasonló, magas hőmérsékleten fémes jellegű. A szerkezeti adatok szerint a Qn(TCNQ)<sub>2</sub>-ben a TCNQ-lánc ekvidiszztáns.

A 4-4'Bip(TCNQ)<sub>4</sub> szintén félvezető, igen kis (0,04 eV) aktiválási energiával.

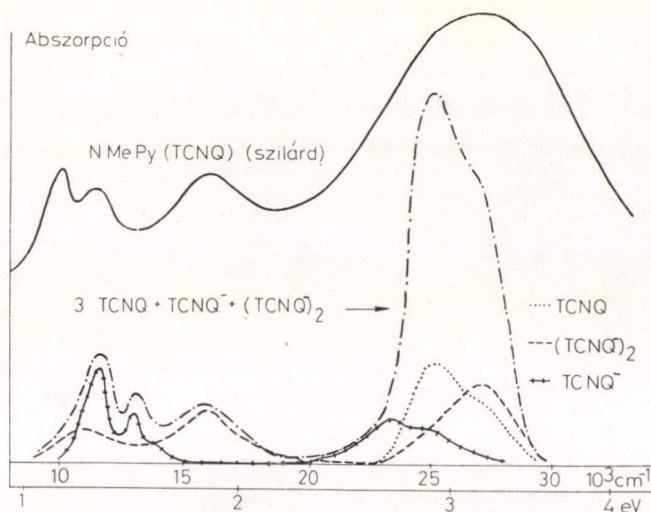
A fent leírt anyagok pormintán mért spektrumai a 39. ábrán láthatók. A 40. ábrán a TCNQ molekula és a TCNQ<sup>-</sup> molekulaion, valamint a (TCNQ)<sub>2</sub> dimer oldatspektrumát vetjük össze az NMePy-sóéval. A dimer oldat és a KTCNQ szilárd spektrumát, ami teljesen a dimerizált TCNQ-láncnak felel meg, *Torrance* [14] nyomán a 41. ábrán mutatjuk be.

A 40. ábráról annyi egyértelműen kiderül, hogy a molekula, az ion és a dimer spektrumának összege — némi eltolódással — kiadja a szilárd fázisú spektrum 6000  $\text{cm}^{-1}$  feletti részét. Az egyes komponensek aránya ugyanakkor már kérdéses. Az ábrán látható összetétel a legegyszerűbb, ami az 1:1 arálynak megfelel a semleges és töltött TCNQ molekulák között. A többi anyagnál ugyanakkor jól látható, hogy egyes elnyelések — legfeltűnőbb módon



39. ábra. Komplex TCNQ-sók szilárd spektruma (diffúz reflexióval és KBr pasztillában felvéve)

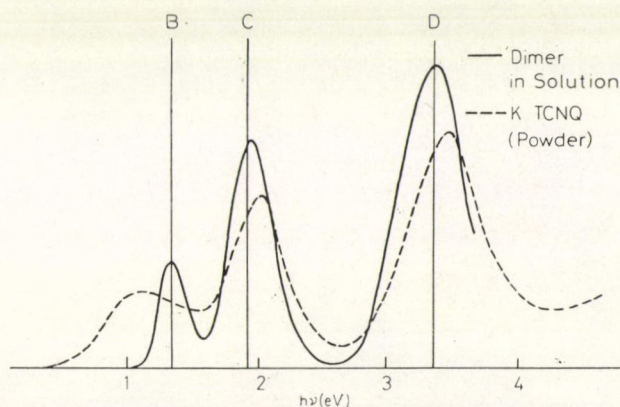




40. ábra. Az N-metil-piridinium(TCNQ)<sub>2</sub> szilárd spektrumának összehasonlítása a 3TCNQ + TCNQ<sup>-</sup> + (TCNQ)<sub>2</sub> oldatspektrumokkal

a 15 000 cm<sup>-1</sup>-es dimer-csúcs — intenzitása anyagról anyagra erősen változik. Az említett elnyelés legerősebb a félvezető jellegű anyagokban, ami — ismerve a MEM-só dimerizált szerkezetét és feltételezve a szerkezeti hasonlóságot az NMePy(TCNQ)<sub>2</sub>-vel — érthető. A jól vezető anyagokban (Qn, 4-4'Bip só) már csak egy elmosódott vállat látunk.

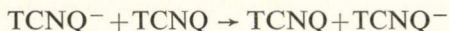
Meglepő még, hogy a dimer töltésátviteli sávját, ami a KTCNQ-ban (41. ábra) 7000 cm<sup>-1</sup> körül jelentkezik, itt nem észleljük. Torrance [14] szerint ez a 11 000 cm<sup>-1</sup>-nél látható TCNQ<sup>-</sup> elnyelési sávval esik egybe. Ez a magyarázat azonban nem fogad-



41. ábra. (TCNQ<sup>-</sup>)<sub>2</sub> oldat- és KTCNQ szilárd porspektruma [14]

ható el fenntartás nélkül, ha meggondoljuk, hogy a komplex sókban, ahol az ionok Coulomb-kölcsönhatását a beépült semleges molekulák nagymértékben árnyékolják, az átmenet energiájának növekedése, tehát a sáv kék eltolódása kevésbé valószínű. Ha pedig vörös eltolódást feltételezünk, a kis intenzitású sávot elfedheti az infravörös átmenet. Mivel egyik feltevés sem bizonyítható, nem tehetünk egyértelmű kijelentést a spektrumok alapján a szomszédos ionok közti töltésátvitel energiájára vonatkozóan. (Ebben a kérdésben többet tudunk meg a TTT-vegyületek vizsgálata alapján, ahol a dimer-sáv helye alig változik és egyértelműen megállapítható.)

Minden vizsgált komplex sóban megtaláljuk  $6000\text{ cm}^{-1}$  alatt a már ismert intermolekuláris



átmenetet. A sáv helye kismértékben változik, és a rosszabbul vezető anyagokban valamivel magasabban van. Ugyanakkor semmiféle kvantitatív egyezés nem fedezhető fel a vezetőképességből számolt termikus aktiválási energia és az átmenet helye között (12. táblázat).

## XII. TÁBLÁZAT

Az infravörös töltésátviteli sáv maximumának energiája ( $\varepsilon_{\max}$ ) és a tiltott sáv szélessége ( $2\Delta$ ) komplex TCNQ-sókban (a vezetőképesség *Mihály György* mérése)

	$2\Delta$	$\varepsilon_{\max}$
$\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$	0	0,35 eV
2-2'Bip(TCNQ) <sub>4</sub>	0	0,35 eV
4-4'Bip(TCNQ) <sub>4</sub>	0,08 eV	0,35 eV
MEM(TCNQ) <sub>2</sub>	0,8 eV	0,45 eV
NMePy(TCNQ) <sub>2</sub>	0,64 eV	0,45 eV

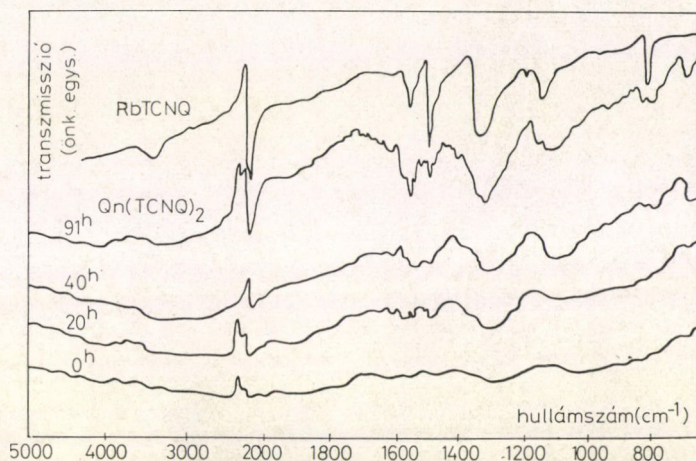
A fentiekből annyi kiderül, hogy *Torrance* [14] érvelését, amelynek során az infravörös elnyelést vezetési sávon belüli, a  $10\,000\text{ cm}^{-1}$ -es csúcsot pedig sáv—sáv elektrongerjesztésnek tulajdonítja, nem fogadhatjuk el, hiszen ebben az esetben a félvezető anyagokban az infravörös csúcs meg sem jelenne. Marad még az a probléma, hogy az intermolekuláris átmeneteket csak a szomszédos molekulák lokális kölcsönhatása határozza-e meg, vagy pedig a hosszú távú kölcsönhatások is szerepet játszanak. Erre vonatkozólag a következő érdekes kísérletet végeztük.

$\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$ -n neutronbesugárással hibahelyeket hoztunk létre, és a különböző besugárási idejű minták infravörös spektrumát mértük. A spektrumokat a 42. ábra mutatja.

Látható, hogy a besugárási idő, azaz a hibahelyek számának növekedésével az elektronátviteli sáv maximuma felfelé tolódik, és egyre kifejezettebbé válik a rezgési szerkezet. Összehasonlításképpen közöljük a félvezető jellegű  $\text{RbTCNQ}$  rezgési színeképét is; a csúcsok megegyeznek a  $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$ -ben besugárázás hatására megjelenőkkel. A vezetőképesség a besugárázás hatására egyre csökken, az alacsony hőmérsékleti aktiválási energia pedig növekszik. A vezetőképesség változásából, valamint oldatspektrumokból megbecsülhető, hogy még a 90 órán keresztül besugárázott mintában is 20% alatt van a sérült molekulák koncentrációja a TCNQ láncon.



Mindez alapot szolgáltat arra a kijelentésre, hogy a rezgési szerkezet megjelenése valóban az elektrongerjesztési csúcs eltolódásának következménye, azaz különböző anyagok esetén is, a sáv helyét meghatározza a vezetőképesség, ha kvantitatív egyezést nem is találtunk. Úgy tűnik azonban, hogy a szennyezés hatására bekövetkező változások a fizikai és kémiai tulajdonságokban érdemesek arra, hogy behatóbban foglalkozzunk velük.



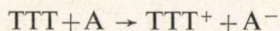
42. ábra. A  $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$  infravörös spektrumának változása neutronbesugárzás hatására

#### 4. AZ EREDMÉNYEK ÉRTÉKELESE

##### 4.1. 1:1 sók

Ide soroljuk a  $\text{TTTAc}$  és  $\text{TTTBr}$  mellett a  $\text{TTT}$ -rodanidot is, bár annak összetétele az 1:1-től némileg eltér. Ez azonban nem jelent észrevehető különbséget a különböző mérési eredményekben.

Az 1:1 összetételű vegyületek oldat-, kristályos spektruma és rezgési spektruma egyaránt arra mutat, hogy bennük a  $\text{TTT}$  ionizációja teljes. Létrejöttükkor tehát a következő megy végbe:



azaz alapállapotuk teljesen ionos: gyök-ion só keletkezik.

Ugyanakkor, a szilárd fázisú spektrumokban, egy olyan átmenet jelenik meg, amely a  $(\text{TTT}^+)_2$  dimer töltésátviteli sávjának felel meg. Az ilyen átmenetek a molekula síkjára merőlegesen polarizáltak, a dimerekben ugyanis a  $\text{TTT}$  molekulák lapjukkal fordulnak egymás felé, így jelentős  $\pi$ -átfedést téve lehetővé. Ennek alapján feltételezzük, hogy a fent említett három anyagban is különálló láncokat alkot a donor és az akceptor, ezáltal megengedve a  $\text{TTT}^+ \rightarrow \text{TTT}^+$  elektronátmeneteket, és nem DADA... rendszerű láncok keletkeznek.



## 4.2. Kevert vegyértékállapotú rendszerek

Ide tartoznak a  $\text{TTT}_2\text{Cl}$ , a  $\text{TTT}_2\text{I}_3$  és  $\text{TTT}_2\text{I}_x\text{Br}_{3-x}$ , továbbá a  $\text{TTTI}_{3-x}\text{C}$  fázis is, ez utóbbi azért, mert a teljesen ionizált ( $x=0$ ) alakot még nem sikerült előállítani, tehát az anyag tartalmaz bizonyos mértékig semleges TTT-t is. Ennek hatása, a TTT-rodaniddal ellentétben, a fizikai tulajdonságokban is jelentkezik.

Mindenekelőtt azt kell leszögezni, hogy a „részleges töltésátvitel” a szilárd halmazállapotú anyagok jellemzője és nem az oldatban létrejövő donor—akceptor páré. Mint a TTT jóddal való konduktometriás titrálása és a  $\text{TTT}_2\text{I}_3$  acetonitriles oldatban való ionos disszociációja is mutatja, a TTT mint donor és halogénakceptorok reakciójakor mindig erős komplex, azaz ionpár keletkezik. Gyenge komplexre jellemző  $D \rightarrow A$  töltésátviteli sávot oldatspektrumban sehol sem találtunk. (A  $\text{TTT}_2\text{I}_3$  diklórmétános oldatában a semleges TTT azért fordul elő, mert az oldószer a trijodidot stabilizálja és más anion nincs a rendszerben.)

A kivált kristályokban, az egy láncon belüli Coulomb-taszítás csökkentése céljából, az ionok közé semleges molekulák épülnek be, ezáltal a kristály elektrosztatikus energiája fedezni tudja az ionizációs energia és elektronaffinitás különbségét. A  $\text{TTT}_2\text{I}_3$  rendszer képződésekor lejátszódó folyamatok:



Teljesen szabatos számoláshoz mindhárom folyamat gázfázisban vett energia-változását kellene tekintetbe vennünk és összehasonlítani a Madelung-energiával. Mivel azonban a (3) reakció energetikáját csak oldatban ismerjük, közelítésként ezt fogjuk használni, megjegyezve, hogy az exoterm reakció reakcióhőjét ezzel valószínűleg alábecsüljük.

Az energiajárárlékok tehát:

TTT ionizációs energia [85]	4,5 eV
I elektronaffinitás [86]	3,1 eV
$\text{I}_3^-$ képződéshő [87]	-0,2 eV
$\text{I} - \text{A} + \text{H}(\text{I}_3^-)$	1,2 eV

Ennél az energiánál a Madelung-energia — abszolút értékben — minden második TTT molekulára lokalizált töltést feltételezve — minden konformáció esetén több mint 1 eV-tal nagyobb, azaz, ellentétben a TTF—TCNQ-val [53], ebben a töltéseloszlás-modellben a kötési energia 1 eV/ $\text{TTT}_2\text{I}_3$  körüli. Minden TTT molekulán +1/2 töltést feltételezve, az összenergia-változás már pozitív, +0,1 eV. Csupa +1 töltésű ionból álló lánc ilyen geometriával nyilván nem jöhetne létre. Ez lehet a magyarázata annak is, hogy a C fázisban — ha a teljes jódtartalmat  $\text{I}_3^-$  formában képzeljük el — a TTT molekulák 10—15%-a semleges.

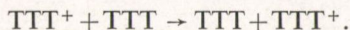
A spektroszkópiai vizsgálatok azt mutatják, hogy a szilárd fázisban felismerhetők az egyes molekulafajták vibrációs, illetve elektrongerjesztései külön-külön. Két intermolekuláris átmenet figyelhető meg: az egyik az 1:1 sóknál már tárgyalt, a dimerre jellemző csúcs:





amellyel kapcsolatban az a feltűnő, hogy ugyanazon a helyen van, mint az 1:1 sók esetében, azaz nem észlelünk semmilyen, vezetési elektronok által okozott árnyékolást. A másik csúcs az infravörös tartományban jelentkezik, igen alacsony ( $\sim 2000 \text{ cm}^{-1}$ ) energián. A TCNQ-sóknál tapasztalt szabályszerűség, nevezetesen, hogy a nagyobb vezetőképességű anyagnál ez a sáv alacsonyabb energián jelentkezik, ezekre a vegyületekre is kiterjeszthető.

Mivel ez a sáv csakis kevert vegyértékű anyagoknál figyelhető meg, feltételezhetjük, hogy ugyanúgy, mint a TCNQ-sókban, elektroncserének felel meg:



Ha a teljesen szabályos, fent leírt alapállapotból indulunk ki, akkor a végállapotban két  $\text{TTT}^+$ -ion kerül egymás mellé. Láttuk már, hogy a Coulomb-energiák ezekben a rendszerekben mennyire jelentősek, ez magyarázza, hogy az átmenethez energia-befektetés kell, ha minimális nagyságú is.

Szabad elektrongázt feltételezve, *Somoano és munkatársai* [88] a  $\text{TTT}_2\text{I}_3$  reflexiós spektrumában  $5000 \text{ cm}^{-1}$ -nél jelentkező csúcsot a Drude—Lorentz modellel magyarázták, az  $5000\text{—}6000 \text{ cm}^{-1}$  közti éles reflexiócsökkenést plazmaélként értelmezve.  $4000 \text{ cm}^{-1}$  alatt azonban nem mérték a reflexiót. A porspektrumokból úgy tűnik, hogy  $1000 \text{ cm}^{-1}$  felett minden abszorpciós csúcs molekuláris vagy intermolekuláris átmenetekkel leírható, anélkül, hogy kollektív gerjesztéseket feltételeznénk.

A kevert vegyértékű sók vezetőképesség-hőmérséklet görbéit összehasonlítva a Perez—Albuérne [63] által 1:1 sókon mért félvezető-jellegű görbékkel, azt találjuk, hogy a TTT sókra is érvényes a több anyagcsaládra tett megállapítás: fémes jellegű vezetéshez szükséges feltétel a kevert vegyértékállapot. (A TCNQ-sóknál azonban láttuk, hogy ez nem egyben elégséges feltétel is.) Ennek alapján azt várjuk, hogy a  $\text{TTT}_2\text{Cl}$  is viszonylag jó vezető lesz. Erre mutat a szelénanalóg, a  $\text{TSeT}_2\text{Cl}$  jó vezetőképessége. Ugyanakkor abból, hogy az intermolekuláris alacsony energiájú sáv felfelé tolódik a jódvegyülethez képest, és hogy a dimerspektrum sokkal kifejezettebben látszik, mint a többi sóban (ez a helyzet a félvezető TCNQ-sókban is), arra következtethetünk, hogy a  $\text{TTT}_2\text{Cl}$  vezetőképessége a  $\text{TTT}_2\text{I}_3$ -énál kisebb lesz. Ezt azonban csak a megfelelő méretű egykristályon végzett ellenállásmérések dönthetik el.

A  $\text{TTT}_2\text{I}_3$  kiugróan jó vezetőképessége azt a lehetőséget vetette fel, hogy, hasonlóan a TTF—TCNQ-hoz, itt is kétláncú vezetésről van szó, azaz a jódlánc is, elektronvezetőként, részt vesz a transzportfolyamatban [12]. Az ionos vezetést ki lehetett zárni, tudva, hogy a vezetőképesség több órás ellenállásmérés alatt sem változik, miközben a jód teljes kiválásához szükséges árammennyiség folyik át rajta. Számításaink a  $\text{TTT}_2\text{I}_3$  fázisra azt mutatják, hogy a legstabilabb konfiguráció az izolált  $\text{I}_3^-$  ionokból álló lánc, amelyben az elektronok egy  $\text{I}_3^-$  egységre lokalizáltak. Egy ilyen lánc, sávszerkezet-számolások szerint,  $1 \text{ eV}$  tiltott sávval rendelkező félvezetőnek felel meg [82], a jód részvétele a vezetésben tehát valószínűtlen. Ugyanakkor *Perlstein* [12] szerint, ha a jódláncon is megengedünk, legalább kismértékben, kevert vegyértéket (ami a nem sztöchiometrikus fázisoknál előfordulhat), kialakulhat részlegesen betöltött vegyértéksáv, azaz fémes állapot. Fémes jellegű jódlánc létezését a keményítő—jód komplexben sem tartják kizártnak [89].

Az a tény, hogy a jódatomok felének brómra való kicserélése a vezetőképességet alig változtatja meg, egyértelmű bizonyíték arra, hogy a jódlánc szerepe a  $\text{TTT}_2\text{I}_3$  vezetésében elhanyagolható. Mind a  $\text{TTT}_2\text{I}_3$ , mind a  $\text{TTT}_2\text{I}_x\text{Br}_{3-x}$  rendszerekben a



TTT lánc lyukvezetése a meghatározó (a Seebeck-együttható pozitív előjele is [68] ezt bizonyítja).

A  $\text{TTTI}_{3-x}$  C fázis vezetőképessége kb. 20-szor alacsonyabb a B fázisénál, illetve a jód-bróm „ötvözeténél”. Ez összefügghet azzal, hogy míg az utóbbi anyagokban az ionizált és semleges molekulák aránya — ultraibolya és infravörös spektroszkópiai méréseink tanúsága szerint — 1:1, a C fázisú jódvegyületben max. 15% a semleges TTT tartalom.

## 5. SZERVES VEZETŐ RENDSZEREK KÉMIAI SZERKEZETÉRE TEHETŐ ÖSSZEFOGLALÓ MEGÁLLAPÍTÁSOK

A tetratietetracén 1:1 gyök—ion sóinak és más összetételű donor—akceptor rendszereink fizikai-kémiai tulajdonságait: képződési viszonyait, kristályszerkezetét, oldat- és szilárd fázisú elektrongerjesztéseit, rezgési színeképét és stabilitását tanulmányoztuk röntgendiffrakció, látható, ultraibolya, infravörös spektroszkópia és Madelung-energia modellszámolások segítségével. Az optikai jellemzők és a vezetőképesség kapcsolatának alaposabb tanulmányozása céljából néhány TCNQ-só optikai vizsgálatát is elvégeztük.

Azt találtuk, hogy a kis ionizációs energiájú ( $I=4,5$  eV) donor minden halogénnel oldatban erős komplexet (ionpárokat) képez. A kristályokban, a kisebb intermolekuláris távolság miatt megnövekedett Coulomb-taszítás elkerülése céljából, semleges molekulák is beépülhetnek a molekulaionok közé. A vizsgált TTT-sók szerkezetéről, egy kivételével, indirekt bizonyítékok alapján — a rezgési spektrum azonos szerkezete, a dimer töltésátviteli sáv megjelenése — feltesszük, hogy külön-külön donor- és akceptorláncokból állnak.

A donorláncban belül, a spektrumokban külön-külön felismerhetők a semleges molekulák, illetve a molekulaionokra jellemző gerjesztések. Ugyanakkor megjelennek az ionról a szomszédos ionra vagy semleges molekulára történő intermolekuláris átmenetek is. A spektrumok alapján tehát a kristályt olyannak képzelhetjük, amelyben különálló, jól definiált oxidációfokú molekulafajták találhatók, lényegesen erősebb kölcsönhatással egymás között, mint egy átlagos molekulakristályban. Ez a kölcsönhatás a láncban belül a  $\pi$ -pályák átfedése révén jön létre, sőt, még a láncok között is lehetséges a kén  $d$ -pályáinak bizonyos mértékű átfedése, ezzel magyarázható lenne, hogy a vezetési anizotrópia kisebb, mint a TCNQ-sókban. A láncban belüli kölcsönhatások leginkább a klasszikus molekulakomplexekéhez hasonlítanak, vagyis az az érdekes helyzet áll elő, hogy nem a donor és az akceptor, hanem a donor azonos vagy eltérő ionizációs állapotai viselkednek gyengén kötött donor—akceptor párként.

Az alapállapot stabilitása, az akceptorláncok szabad csúszása és a nem vezető állapot kialakulása a jódláncban a  $\text{TTT}_2\text{I}_3$  esetében ionkristályszerű modellben Madelung-energia számításokból is adódik, összhangban a kísérletekkel.

Ha a fenti eredményeket összehasonlíjuk a két, eddig hasonló módszerekkel vizsgált anyagcsaláddal, a TCNQ és a tetratiofulvalén-halogén vegyületekkel, [81] azt találjuk, hogy az itt leírt kép általánosítható:

- kis ionizációs potenciálú donor vagy nagy elektronnaffinitású akceptor alkotja a láncokból álló kristályszerkezetben a vezető láncot;
- oldatban az ellenionnal erős komplex alakul ki;



— a Coulomb-taszítás csökkentése céljából megvan a lehetőség a kristályban a töltésvisszaadásra, így kevert vegyértékű állapot jöhet létre;

— a spektrumok intra- és intermolekuláris átmeneteket egyaránt tartalmaznak; az alapmolekula ionizált formájának dimerjében előforduló töltésátviteli sáv minden 1:1 sóban és a kevert vegyértékállapotúak nagy részében észlelhető, a kevert vegyértékállapotúakban elektroncsere is gerjeszthető a különböző töltésű molekulák között;

— fémes vezetés csak kevert vegyértékállapotú rendszerekben jön létre, de ez nem elégséges feltétel.

Mindebből tehát az következik, hogy a molekula-, illetve ionkristály-modell a fizikai-kémiai tulajdonságok nagy részét megmagyarázza, kivéve a legfontosabbat: a vezetőképesség fémes jellegét. Az elektronlokalizáció mértéke itt a fémekhez képest igen kicsi, ugyanakkor a donorláncon megfigyelt optikai töltésátvitel nem elégséges magyarázat az anomális, egy aktiválási energiával semmiképpen sem jellemezhető hőmérsékletfüggésre.

Az a tény azonban, hogy az egyszerű kémiai kép a vezetőképességre nem alkalmazható, egyáltalán nem meglepő, hiszen az egydimenziós rendszerek transzporttulajdonságainak elméleti fizikai képe sincs még kidolgozva, éppen ezért tapasztalható a terület iránt elméleti részről is igen nagy érdeklődés. Az elméleti kémiai tárgyalásban a kristályos állapot, míg az elméleti fizikai tárgyalásban a molekulák saját szabadsági fokainak figyelembevétele okoz gondot. Remélhető, hogy az e téren folyó mind elméleti, mind kísérleti intenzív kutatómunka az anyagok kémiai és fizikai viselkedése közti kapcsolatot az eddiginél nagyobb mértékben tisztázni fogja.

## FÜGGELÉK

### A Madelung-energia számítására alkalmazott numerikus eljárás paramétereinek meghatározása

Az eljárás az Ewald-módszerben alkalmazott képletekkel számolja A, B, C-t (l. 2.3. fejezet). Szabad paraméterei a Gauss-eloszlások szélességét jellemző  $\eta$ , valamint az  $E, F, G, H, K, L$  összegzési határok. Itt némileg módosítottuk az eredeti [51] eljárást, és a  $-E \leq e \leq E \dots -L \leq l \leq L$  „hasábok” helyett ún. „héjakra” összegeztünk, amelyeket direkt, illetve reciprok térben az  $R_D$ , illetve  $R_R$  sugarak jellemznek ( $R_D$ -t  $V^{1/3}$ ,  $R_R$ -t  $2\pi/V^{1/3}$  egységben mérjük, ahol  $V$  az elemi cella térfogata). Így C-ben csak azokat a tagokat vesszük figyelembe, amelyekre

$$l_{efg}^2 \leq R_D^2$$

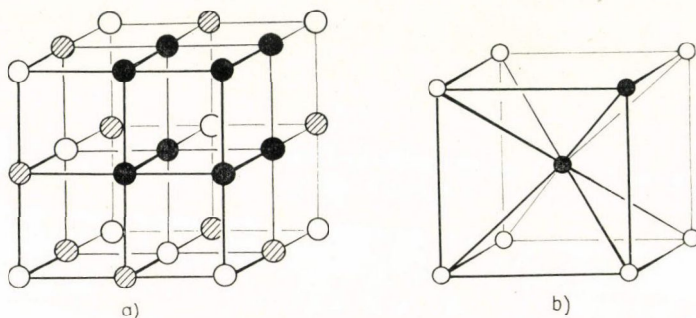
és B-ben

$$d_{hkl}^2 \leq R_R^2.$$

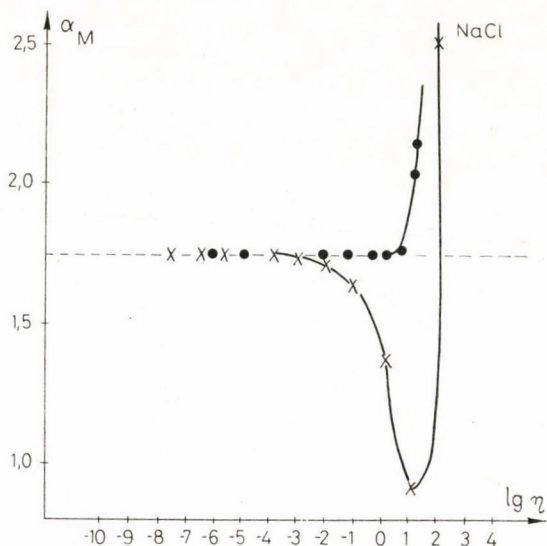
Ennek a módosításnak két előnye van. Egyrészt minden irányban körülbelül azonos távolságig való összegzést tesz lehetővé, ami különösen fontos erősen anizotróp elemi cellák esetén. Másrészt, a hasábok „sarkainak” levágásával (ahonnan a járulékok már kicsi) a program futási idejét csökkenthetjük. Tekintve, hogy ez  $\text{TTT}_2\text{I}_3$ -ra a CDC 3300-on 90 perc, ez szintén nem elhanyagolható szempont.

A NaCl és CsCl számolt Madelung-állandóját és a TTF—TCNQ Madelung-energiáját különböző  $R_D$  és  $R_R$  értékekre a 44., 45. és 46. ábra mutatja.

A NaCl (43. ábra) esetében kétféle töltéeloszlást vettünk fel: a  $\text{NaCl}^a$  egész töltéseket tartalmaz, a  $\text{NaCl}^b$  szerkezetben pedig az elemi cella határán elhelyezkedő töltéseket megosztva vettük figyelembe az egyes cellákban (lapközépen levő töltés 1/2, élközépen levő 1/4, csúcson levő pedig 1/8 részben tartozott egy cellához). CsCl-ra hasonlóképpen jártunk el. TTF—TCNQ-ra a legegyszerűbb modellt alkalmaztuk: a molekulákat egységnyi töltésű ponttöltésekkel ábrázoltuk, amelyek



43. ábra. (a) NaCl és (b) CsCl-szerkezet. A besötétített pontok az a) töltésmodellekben figyelembe vett egész töltések



44. ábra. A NaCl Madelung-állandójának  $\eta$ -függése (a szaggatott vonal a termokémiai úton meghatározott érték [76]) ●  $\text{NaCl}^a$  modell  $R_D^a = R_R^a = 15 \times \text{NaCl}^b$  modell  $R_R^b = 9$   $R_D^b = 15$



a molekulák geometriai középpontjában foglaltak helyet. A cella határain levő töltéseket a *b*) modelleknek megfelelően rendeltük megosztva az egyes elemi cellákhoz.

A  $\text{NaCl}^a$  (43. ábra) Madelung-állandója az  $\eta=5$  értéktől kezdve  $\eta$ -tól független és az irodalmi  $\alpha=1,7476$  értéket adja már viszonylag kis összegzési határra ( $R_D^2=R_R^2=15$ ) is. A legkülső el nem hanyagolt héj járuléka 0,1—0,01%. A  $\text{NaCl}^b$  szerkezet sajátos minimumgörbét mutat, kisebb értéknél válik  $\eta$ -függetlenné ( $\times 10^{-4}$ ), de ettől kezdve állandó és szintén az irodalmi  $\alpha$  értéket veszi fel.

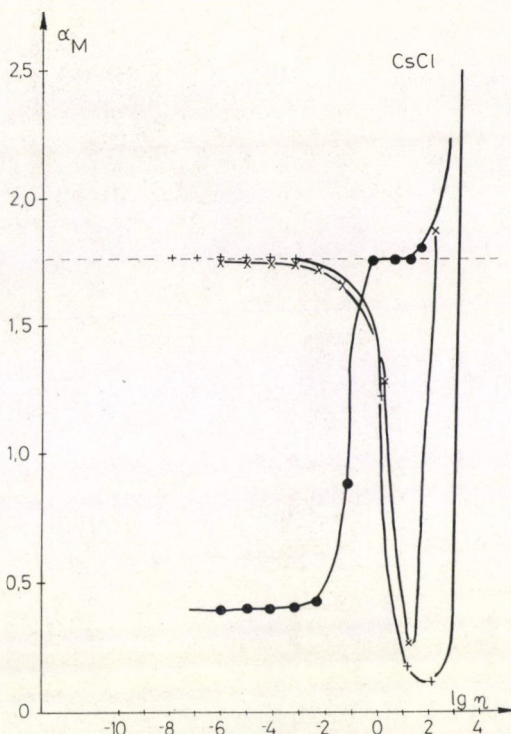
$\text{CsCl}$ -ra a helyzet már bonyolultabb. Az  $\eta$ -függés sokkal erősebb (45. ábra), sőt, a  $\text{CsCl}^a$  szerkezetben kis  $\eta$  értékekre  $\alpha$  teljesen más értékhez tart, mint a valóságos (1,7627 helyett 0,4041). A  $\text{CsCl}^b$  szerkezet, melynek dipólmomentuma lényegesen kisebb, már a helyes  $\alpha$  értéket adja kis  $\eta$ -nál. Itt az összegzési határoktól való függés is látszik: kis összegzési határral az  $\alpha$  értéket némileg alábecsüljük.

A TTF—TCNQ (46. ábra)  $E_M$ — $\eta$  görbéje ugyanolyan jellegű, mint a többi töltéses szerkezeté.

Érdekes módon, itt a kisebb összegzési határral számolt görbe konvergál az Epstein [57] által meghatározott  $-0,57$  eV-hoz, valamivel nagyobb  $R_D$ -re némileg nagyobb abszolút értékű energiát kapunk ( $-0,60$  eV). Egy további, nagy sugarú számolás  $R_D^2=70$ ,  $\eta=10^{-7}$  paraméterekkel visszaadja a  $-0,57$  eV energiát.

Az  $\eta$ — $E_M$  görbék különbözősége arra figyelmeztet, hogy az optimális értéket csak úgy tudjuk meghatározni, ha a vizsgált kívánt rendszerhez hasonló töltéeloszlásokon végzünk próbaszámolásokat, azaz szerves kristályokra kis dipólmomentumú, delokalizált rendszereken. A  $\text{NaCl}$ -on azért nem látunk a  $\text{CsCl}$ -hoz hasonló drasztikus effektust, mert ott az *a*) modellben is kicsi dipólmomentum (43. ábra).

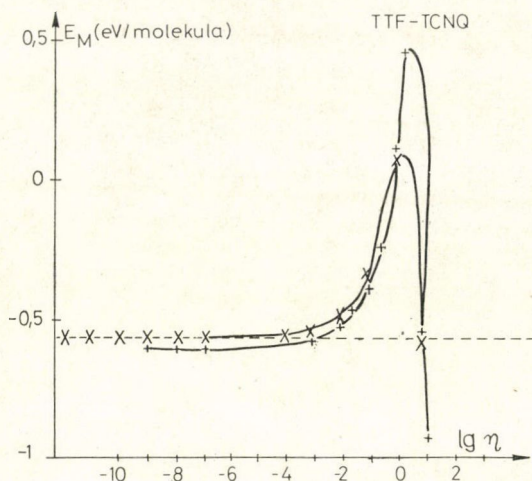
Megjegyezzük még, hogy  $\eta \ll 1$  esetén a reciproktérbeli összeg ( $E_M$ -ben a B tag) már nullát adott minden vizsgált esetben, tehát a reális  $E_M$  értékeket már tisztán direkt térbeli összegzéssel kaptuk. Ez nem különösebben meglepő, ha meggondoljuk, hogy a töltéseket alkalmazó modellek tulajdonképpen az Evjen-elrendezésnek felelnek meg. A TTF—TCNQ-ban pedig éppen az Epstein [57] által, módosított Evjen-módszerrel kapott eredményt kapjuk kis  $\eta$ -ra. A kis  $\eta$  ugyanis azt eredményezi, hogy igen széles Gauss-eloszlásokat szuperponálunk a ponttöltésekre, ezek tehát egy



45. ábra. A  $\text{CsCl}$  Madelung-állandójának  $\eta$  függése (a szaggatott vonal, mint a 44. ábrán)

- $\text{CsCl}^a$  modell  $R_R^2=11$   $R_D^2=14$
- ×  $\text{CsCl}^b$  modell  $R_R^2=4$   $R_D^2=4$
- +  $\text{CsCl}^b$  modell  $R_R^2=8$   $R_D^2=8$





46. ábra. A TTF—TCNQ Madelung-energiájának  $\eta$ -függése (a szaggatott vonal az Evjen-módszerrel számolt [57] érték)

$$\times R_R^2 = 1 \quad R_D^2 = 9 \quad + R_R^2 = 15 \quad R_D^2 = 15$$

pontban igen kis járulékot adnak, vagyis csak a ponttöltések hatását számoljuk, ami éppen az Evjen-összeg.

Fentiek alapján, a  $\text{TTT}_2\text{I}_3$  Madelung-energiájának meghatározására az  $\eta = 10^{-3}$ ,  $R_R = 0$ ,  $R_D^2 = 10$  paramétereket használtuk. A legkülső figyelembe vett héj járuléka kb. 0,5%.

#### A DISSZERTÁCIÓBAN ISMERTETETT ÚJ EREDMÉNYEK

1. Oldatspektroszkópia és konduktometriás titrálás segítségével megállapítottuk, hogy a tetratitetracén (TTT) donormolekula oldatban minden halogénnel erős komplexet (ionpárt) képez. A konduktometriás titrálás jódval kétféle sztöchiometriát adott:  $\text{TTTI}$  és  $\text{TTTI}_2$ , jelezve, hogy a donor +2 töltésű ionig is oxidálható.

2. Többszöri átkristályosítás, röntgendiffrakció és oldat-, valamint diffúz reflexiós spektrumok alapján meghatároztuk a szilárd TTT-jód rendszer három különböző kristályos fázisának összetétel-tartományát és kémiai szerkezetét.

3. Meghatároztuk a  $(\text{TTT}^+)_2$  dimer abszorpciós látható/UV spektrumát oldatfázisban.

4. Felvettük a TTT egyszerű ( $\text{TTT}-\text{CH}_3\text{COO}$ ,  $\text{TTTBr}$ ,  $\text{TTTSCN}$ ) és komplex sóinak ( $\text{TTT}_2\text{Cl}$ ,  $\text{TTT}_2\text{I}_3$ ) spektrumát szilárd pormintákon,  $700-36\,000\text{ cm}^{-1}$  között. A talált csúcsokat a  $\text{TTT}^+$  molekulaionokból és (komplex sókban) TTT molekulákból álló lánc intramolekuláris, vagy legközelebbi szomszédra történő elektrongerjesztéseiként értelmeztük.

5. Meghatároztuk a fenti sók rezgési spektrumát a  $700-4000\text{ cm}^{-1}$  tartományban. A talált rezgési csúcsok a TTT, illetve  $\text{TTT}^+$  rezgéseiként értelmezhetők.

6. Vizsgáltuk a Madelung-energia számításra kidolgozott Ewald-módszer konvergenciatulajdonságait sokatomos elemi cellákból álló kristályokra. Azt találtuk, hogy az ilyen rendszerek esetén a néhány (2—3) szomszédos cellára való direkt összegzés (minden irányban) már kielégítő eredményt szolgáltat.

7. Kiszámoltuk a  $\text{TTT}_2\text{I}_3$  Madelung-energiáját a jódlánc helyzetének függvényében. A kapott görbe kb.  $1,5\text{ Å}$ -on belüli szabad csúszást enged meg a trijodid-ionokból álló láncnak a TTT-alrácsban. A görbe minimuma a krisztallográfiailag megállapított legvalószínűbb  $\text{I}_3^-$  helyzetnél van.



8. Vizsgáltuk a  $TTT_2I_xBr_{3-x}$  rendszer (a világon másodikként előállított szerves „ötvezet”) fizikai-kémiai tulajdonságait, és azokat összehasonlítottuk vezetőképességi adatokkal. Az eredmények alig különböztek a  $TTT_2I_3$ -ra kapottaktól, amiből arra következtetünk, hogy mind az optikai, mind a vezetési tulajdonságokat a donorlánc határozza meg.

9. Meghatározzuk a komplex TCNQ sók szilárd fázisú spektrumát, a 4. pontban említett tartományban. A hozzárendelés is az ottanihoz hasonló, annival több információtartalommal, hogy az intermolekuláris átmenetek energiája és a vezetőképesség között csak gyenge kvalitatív összefüggés van.

10. Vizsgáltuk a kinolinium(TCNQ)<sub>2</sub> infravörös spektrumának változását neutronbesugárzás hatására. A neutronok által keltett rendezetlenség a legalacsonyabb energiájú elektronátmenet kék eltolódását okozza, ez újabb bizonyíték az intermolekuláris jellegre.

11. A TTT-vegyületek tulajdonságait összevetettük a TCNQ és TTF-alapú rendszerekével (az utóbbiakat az irodalomból ismertük), és azt találtuk, hogy mindhárom anyagcsalád fizikai-kémiai jellemzői azonos módon értelmezhetők: a molekulák, illetve molekulaionok megtartják identitásukat a kristályban, de kölcsönhatásuk lényegesen erősebb, mint a közönséges molekula-kristályokban.

### KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Szeretném megköszönni Pál Lénárd akadémikusnak, Szabó Ferencnek, a KFKI főigazgatójának, Vasvári Béla és Krén Emil igazgatóknak, hogy lehetőséget adtak a dolgozat elkészítésére.

Megköszönöm Kósa Somogyi István főosztályvezetőnek, hogy kedvező munkakörülményeket biztosított, munkámat mindvégig figyelemmel kísérte és támogatta.

Munkámat a Szerves Szilárdtestek Osztályon, Grüner György osztályvezető irányítása alatt végeztem. Megköszönöm témavezetőm, Grüner György elméleti és gyakorlati útmutatásait és állandó, mindenre kiterjedő segítségét. Az osztály minden tagjának köszönöm a számomra hasznos együttműködést, a közös munkát. Külön köszönettel tartozom Grüner Györgynek, Jánossy Andrásnak és Zawadowski Alfrédnek mindazért, amire a szilárdtestfizika alapjaiból megtanítottak.

Ritvayné dr. Emandity Katalinnak és Pintér Katalinnak a minták előállításáért, Szirmai Lászlónak a jódanalizisekért mondok köszönetet. Mihály Györgynek az ellenállásmérések rendelkezésemre bocsátását, Holczer Károlynak, Kertész Miklósnak és Mihály Lászlónak az eredmények értelmezésében nyújtott segítségét köszönöm.

Munkám műszerigényes jellegéből adódóan igen sok külső segítséget vettem igénybe. Kiemelten szeretném megköszönni Szabó Zoltán akadémikusnak, hogy lehetővé tette számomra a tanszéken található diffúz reflexiós és IR spektrométer hosszú időn keresztül való használatát. Köszönöm Wajand Judit segítségét az infravörös spektrumok felvételében és hasznos tanácsait.

Zsoldos Lehelnek a röntgenfelvételekért, Mink Jánosnak és Kemény Gábornak a nagyfelbontású infravörös spektrumokért, Farsang Györgynek az elektrokémiai mérésekhez nyújtott segítségért tartozom köszönettel.

Megköszönöm Schiller Róbertnek a kézirat gondos átolvasását és hasznos megjegyzéseit.

Köszönetet mondok Szakács Károlynak, Pavlovskzi Lászlónak, Major Mihálynak és Engi Ferencnek a technikai segítségért.

### IRODALOM

1. ed. D. Fox, M. M. Labes, A. Weissberger: Physics and Chemistry of the Organic Solid State, Wiley-Interscience, 1963.
2. R. Foster: Organic Charge-Transfer Complexes. Academic Press, London—New York, 1969.
3. Kőrös E.: Molekulakomplexek. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1976.
4. Mihály György: Szerves töltésátviteli sók egyenáramú vezetőképességének és termoelektromotoros ercjének vizsgálata. Egyetemi doktori értekezés, KFKI, 1977.
5. R. S. Mulliken, J. Am. Chem. Soc. 74, 811, 1952.
6. H. Akamatu, H. Inokuchi, Y. Matsunaga, Nature 175, 168, 1954.
7. R. L. Melby, R. J. Harder, W. R. Hertler, W. Mahler, R. E. Benson, W. E. Mochel, J. Am. Chem. Soc. 84, 3374, 1962.
8. J. Ferraris, D. O. Cowan, V. Walatka, Jr., J. H. Perlstein, J. Am. Chem. Soc. 95, 948, 1973.
9. F. Wudl, G. A. Thomas, D. E. Schafer, W. M. Walsh, Jr., Mol. Cryst. Liq. Cryst. 32, 147, 1976.
10. J. L. Petersen, C. S. Schramm, D. R. Stojakovic, B. M. Hoffman, T. J. Marks, J. Am. Chem. Soc. 99, 286, 1977.



11. G. Mihály, K. Ritvay-Emandity, A. Jánossy, K. Holczer, G. Grüner, *Solid State Comm.* 21, 721, 1977.
12. J. H. Perlstein, *Angew. Chem.* 89, 534, 1977.
13. J. Tanaka, M. Tanaka, T. Kawai, T. Takabe, O. Maki, *Bull. Chem. Soc. Japan* 49, 2358, 1976.
14. J. B. Torrance, B. A. Scott, F. B. Kaufman, *Solid State Comm.* 17, 1369, 1975.
15. H. R. Zeller, *Festkörperprobleme XIII — Advances in Solid State Physics*, ed. H. J. Queisser, Pergamon-Vieweg, 1973.
16. W. D. Grobman, R. A. Pollak, O. E. Eastman, E. T. Maas, Jr., B. A. Scott, *Phys. Rev. Lett.* 32, 534, 1974.
17. G. Mihály, K. Ritvay-Emandity, G. Grüner: *Proc. Conf. on Organic Conductors and Semiconductors*, ed. L. Pál, G. Grüner, A. Jánossy, J. Sólyom. Springer-Verlag — Akadémiai Kiadó, 1977, 535. o.
18. R. H. Boyd, W. D. Phillips, *J. Chem. Phys.* 43, 2927, 1965.
19. H. A. Benesi, J. H. Hildebrand, *J. Am. Chem. Soc.* 71, 2703, 1949.
20. Körös E., i. m. 85. old.
21. Körös E., i. m. 231. old.
22. J. Néel, P. Dupuis, *Quelques aspects de l'état solide organique*. Masson and Co. 91. old.
23. H. T. Jonkman, J. Kommandeur, *Chem. Phys. Lett.* 15, 496, 1972.
24. W. E. Geiger, Jr., *J. Phys. Chem.* 77, 1862, 1973.
25. K. H. Hausser, J. N. Murrell, *J. Chem. Phys.* 27, 500, 1957.
26. H. Wedel, W. Haase, *Ber. d. Bunsenges.* 80, 1342, 1976.
27. I. Haller, F. B. Kaufman, *J. Am. Chem. Soc.* 17, 1464, 1976.
28. M. Kertész, Á. I. Kiss, J. Koller, H. Wedel, *Chem. Phys. Lett.*, közlés alatt.
29. J. C. Slater, W. Shockley, *Phys. Rev.* 50, 705, 1936.
30. Y. Matsunaga, *Helv. Phys. Acta* 36, 800, 1963.
31. Y. Matsunaga, Y. Suzuki, *Bull. Chem. Soc. Japan* 45, 337, 1972.
32. Y. Iida, *Bull. Chem. Soc. Japan* 42, 71, 1969.
33. Y. Iida, *Bull. Chem. Soc. Japan* 42, 637, 1969.
34. S. Hiroma, H. Kuroda, H. Akamatu, *Bull. Chem. Soc. Japan* 44, 9, 1971.
35. T. Kondow, K. Siratori, H. Inokuchi, *J. Phys. Soc. Japan* 23, 98, 1967.
36. T. Kondow, T. Sakata, *Phys. Stat. Sol. (a)* 6, 551, 1971.
37. A. A. Bright, A. F. Garito, A. J. Heeger, *Solid State Comm.* 13, 943, 1973.
38. C. S. Jacobsen, K. Bechgaard, J. R. Andersen, *Lecture Notes in Physics*, Vol. 65, ed. L. Pál et al., 349. old.
39. Körös E., i. m. 101. old.
40. T. J. Marks, D. F. Webster, S. L. Ruby, S. Schultz, *J. C. S. Chem. Comm.* 1976, 444.
41. M. Tasumi, *Chem. Lett.* 1972, 75.
42. F. Inagaki, I. Harada, T. Shimanouchi, M. Tasumi, *Bull. Chem. Soc. Japan* 45, 3384, 1972.
43. B. Lunelli, C. Pecile, *J. Chem. Phys.* 52, 2375, 1970.
44. A. Girlando, R. Bozio, C. Pecile, *Chem. Phys. Lett.* 22, 553, 1973.
45. R. M. Vlasova, *Bull. Acad. Sci. USSR, Chem. Ser.* 20, 718, 1971.
46. M. J. Rice, S. Strässler, *Solid State Comm.* 13, 125, 1973.
47. M. J. Rice, S. Strässler, *Solid State Comm.* 13, 1931, 1973.
48. R. M. Metzger, *J. Chem. Phys.* 63, 5090, 1975.
49. A. J. Heeger, A. F. Garito, *Proc. NATO Summer Inst. of Low-Dimensional Conductors*, ed. H. J. Keller, Plenum, New York, 1975, 89. old.
50. B. D. Silverman, W. D. Grobman, J. B. Torrance, *Chem. Phys. Lett.* 50, 152, 1977.
51. R. M. Metzger, *J. Chem. Phys.* 57, 1867, 1972.
52. R. M. Metzger, *J. Chem. Phys.* 57, 1876, 1972.
53. J. B. Torrance, B. D. Silverman, *Phys. Rev.* B15, 788, 1977.
54. B. A. Scott, S. J. LaPlaca, J. B. Torrance, B. D. Silverman, B. Welber, *J. Am. Chem. Soc.* 99, 6631, 1977.
55. R. M. Metzger, A. N. Bloch, *J. Chem. Phys.* 63, 5098, 1975.
56. V. E. Klymenko, V. Ya. Krivnov, A. A. Ovchinnikov, I. I. Ukrainskii, A. F. Shvets, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 69, 240, 1975.
57. A. J. Epstein, N. O. Lipari, D. J. Sandman, P. Nielsen, *Phys. Rev.* B13, 1569, 1975.
58. C. Marschalk, C. Stumm, *Bull. Soc. Chim. France* 1948, 418.
59. C. Marschalk, L. Woerth, *Bull. Soc. Chim. France* 1950, 452.
60. C. Marschalk, J. P. Niederhauser, *Bull. Soc. Chim. France* 1952, 147.
61. C. Marschalk, *Bull. Soc. Chim. France* 1952, 800.



62. Y. Matsunaga: J. Chem. Phys. 42, 2248, 1965.
63. E. A. Perez-Albuerné, H. Johnson, Jr., D. J. Trevo, J. Chem. Phys. 55, 1547, 1971.
64. Y. Matsunaga, Bull. Chem. Soc. Japan 45, 770, 1972.
65. I. F. Shchegolev, „Szerves vezetők és félvezetők” konferencia, Siófok, 1976, előadás.
66. V. F. Kaminskii, M. L. Khidekel, R. B. Lyubovskii, I. F. Shchegolev, R. P. Shibaeva, E. B. Yagubskii, A. V. Zvarykina, G. L. Zvereva, Phys. Stat. Sol. (a) 44, 77, 1977.
67. L. C. Isett, E. A. Perez-Albuerné, Solid State Comm. 21, 433, 1977.
68. G. Mihály, A. Jánossy, G. Grüner, Solid State Comm. 22, 771, 1977.
69. L. I. Buravov, G. I. Zvereva, V. F. Kaminskii, L. P. Rosenberg, M. L. Khidekel, R. P. Shibaeva, I. F. Shchegolev, E. B. Yagubskii, J. C. S. Chem. Comm. 1976, 720.
70. D. L. Smith, H. R. Luss, Acta Cryst. B33, 1974, 1977.
71. F. Gutmann, J. Sci. Ind. Res. 26, 19, 1967.
72. W. Gabes, D. J. Stufkens, Spectrochim. Acta A30, 1835, 1974.
73. G. Kortüm, Reflexionsspektroskopie. Springer, 1969.
74. Kamarás K., Szakdolgozat. ELTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, 1976.
75. Vidóczy T., Diákköri dolgozat, ELTE TTK, 1973.
76. C. Kittel, Bevezetés a szilárdtestfizikába. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1966, 3. fejezet (91. old.)
77. E. L. Burrows, S. F. A. Kettle, J. Chem. Educ. 52, 58, 1975.
78. C. Kittel, i. m. 653. old.
79. I. F. Shchegolev, E. B. Yagubskii, személyes közlés.
80. J. Toussaint, O. Dideberg, Bull. Soc. Roy. Sci. Liège 36, 666, 1972.
81. J. B. Torrance, E. A. Scott, E. Welber, P. E. Seiden, F. B. Kaufman, Phys. Rev. B, megjelenés alatt.
82. Kertész M., nem publikált eredmény.
83. C. L. Ma, R. Williams, S. Samson, R. Somoano, Bull. Am. Phys. Soc. 23, 424, 1978.
84. R. Comés, S. Megtert, J. P. Pouget, I. F. Shchegolev, H. Temkin, Bull. Am. Phys. Soc. 23, 424, 1978.
85. Y. Harada, H. Inokuchi, Bull. Chem. Soc. Japan 39, 1443, 1966.
86. L. Pauling, The nature of the Chemical Bond, Cornell University Press, 1960.
87. A. I. Popov Halogen Chemistry (ed. V. Gutmann), Academic Press, London—New York, 1967, 225. old.
88. R. B. Somoano, S. P. S. Yen, V. Hadek, S. K. Khanna, M. Novotny, T. Datta, A. M. Hermann, J. A. Woolam, Phys. Rev. B, közlés alatt.
89. J. M. Reddy, K. Knox, M. B. Robin, J. Chem. Phys. 40, 1082, 1964.
90. P. Carsky, személyes közlés.

#### PUBLIKÁCIÓK

1. K. Kamarás, K. Ritvay-Emandity, G. Mihály, G. Grüner, N. Rysava: Impurity effects in the organic charge transfer salt  $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$ . J. Phys. C10, L423, 1977.
2. K. Kamarás, K. Ritvay-Emandity, G. Mihály, G. Grüner: Electronic spectra of the organic charge transfer salts  $\text{TTTI}_n$ . Solid State Comm. 24, 93, 1977.
3. K. Kamarás, G. Grüner, G. A. Sawatzky: Optical absorption in complex TCNQ salts. KFKI preprint 1978—28; Solid State Comm., közlés alatt.
4. K. Kamarás, G. Mihály, G. Grüner, A. Jánossy: Highly conducting organic “alloys”:  $\text{TTT}_2\text{I}_x\text{Br}_{3-x}$ . KFKI preprint 1978—47; J. C. S. Chem. Comm., közlésre elfogadva.
5. M. Kertész, K. Kamarás: On convergence properties of Madelung calculations in organic solids. Chem. Phys. Lett., közlésre benyújtva.
6. K. Kamarás, M. Kertész: Coulomb effects in the organic charge transfer salt  $\text{TTT}_2\text{I}_3$ . Solid State Comm., közlésre elfogadva.
7. K. Kamarás, G. Grüner: Optical properties of tetrathiotetracene salts. Solid State Comm., közlésre benyújtva.





# KÉTFAJTA LEPTONTÖLTÉS EGY LEHETSÉGES GEOMETRIAI ÉRTELMEZÉSE

PARRAGH LEVENTE

A természetben a  $\tau$  neutrínókat is figyelembe véve háromféle neutrínó létezik, ugyanakkor csak egyfajta kétkomponensű neutrínó egyenletet tudunk felírni. E dolgozatban a klasszikus tér-elméleti módszerek felhasználásával megpróbálunk minőségileg differenciálgeometriai magyarázatot adni erre.

Általánosan ismert Einstein egységes térelmélettel kapcsolatos elképzelése, mely szerint a metrikus tenzor nem szimmetrikus [1]. Ez az elgondolás adta az ötletet e munkához.

E papíron nem egy egységesített térelméleti modelltől van szó, és a metrikus tenzor nem azonosan szimmetrikus voltára vonatkozó feltételezést is elvetjük, csupán az elsőrendű Christoffel szimbólumokban szereplő másodrendű tenzorról tételezzük fel, hogy van aszimmetrikus része is.

Ha egy (szimmetrikus) metrikus tenzorral jellemzett görbült térben a vektorok párhuzamos eltolását úgy kívánjuk értelmezni, hogy az áthelyezés során a vektorok abszolút értéke ne változzon, de nem ragaszkodunk az infinitezimális paralelogrammák létezéséhez, akkor az elsőfajú Christoffel-szimbólumokban a metrikus tenzor mellett felléphet egy aszimmetrikus tenzor is. Részletesen az áthelyezett vektort felülvonással jelölve:

$$\bar{v}^i = v^i - A_k{}^i{}_t dx^k v^t \quad (1)$$

$$A_k{}^i{}_t = g^{il} A_{klt} \quad (2)$$

$$A_{klt} = \Gamma_{klt} + \lambda_{klt} \quad (3)$$

$$\Gamma_{klt} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial g_{kl}}{\partial x^t} + \frac{\partial g_{lt}}{\partial x^k} - \frac{\partial g_{kt}}{\partial x^l} \right) \quad (4)$$

$$\lambda_{klt} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial x^t} + \frac{\partial \varepsilon_{lt}}{\partial x^k} - \frac{\partial \varepsilon_{kt}}{\partial x^l} \right) \quad (5)$$

$$\varepsilon_{ik} = -\varepsilon_{ki}. \quad (6)$$

A  $\lambda_{ikl}$  mennyiségnek a következő fontosabb tulajdonságai vannak:

1. teljesen aszimmetrikus

$$\lambda_{ikl} = -\lambda_{kil} = -\lambda_{ilk} = -\lambda_{lki} \quad (7)$$



2. invariáns a következő transzformációval szemben:

$$\varepsilon_{ik} \rightarrow \varepsilon'_{ik} = \varepsilon_{ik} + \frac{\partial S_i}{\partial x^k} - \frac{\partial S_k}{\partial x^i} \quad (8)$$

$$\lambda_{ikl} \rightarrow \lambda'_{ikl} = \lambda_{ikl}, \quad (9)$$

ahol  $s_i$  egy tetszőleges mennyiség.

3. általános koordináta transzformáció során harmadrendű tenzorként transzformálódik. Ez okból  $\Gamma_{il}^k + \lambda_{il}^k$  és  $\Gamma_{il}^k - \lambda_{il}^k$  is „jó” áthelyezési paraméter.

A 3. tulajdonság miatt egy  $v_i$  vektor kovariáns differenciálását illetően három lehetőség van:

$$\nabla_k v_i = \frac{\partial v_i}{\partial x^k} - \Gamma_{ki}^t v_t \quad (10)$$

$$\overset{+}{\nabla}_k v_i = \frac{\partial v_i}{\partial x^k} - \Gamma_{ki}^t v_t - \lambda_{ki}^t v_t \quad (11)$$

$$\bar{\nabla}_k v_i = \frac{\partial v_i}{\partial x^k} - \Gamma_{ki}^t v_t + \lambda_{ki}^t v_t. \quad (12)$$

A  $\nabla_k$  kifejezhető  $\overset{+}{\nabla}_k$ -vel és  $\bar{\nabla}_k$ -vel:  $\nabla_k = \frac{1}{2}(\overset{+}{\nabla}_k + \bar{\nabla}_k)$ . A  $\overset{+}{\nabla}_k$  és  $\bar{\nabla}_k$  kifejezések utolsó tagjai igen hasonlítanak az elektron, ill. pozitron impulzusoperátorában fellépő  $\pm \mu_0 e A_i$  tagra, ezért feltételezzük, hogy  $e$  határozatlan előjel leptontöltést képvisel.

E feltételezés szerint tehát kétféle kétkomponensű spinorral leírható neutrínót  $\overset{+}{\Psi}$ -val és  $\bar{\Psi}$ -val jelölve, a hozzájuk tartozó neutrínó egyenletek a következők lesznek:

$$\sigma^{iA\dot{A}} \frac{\hbar}{i} \overset{+}{\nabla}_i \overset{+}{\Psi}_A = 0 \quad (13)$$

$$\sigma^{iA\dot{A}} \frac{\hbar}{i} \bar{\nabla}_i \bar{\Psi}_A = 0. \quad (14)$$

(A nagy görögbetűs pontozott, ill. pontozatlan index kétkomponensű spinor-indexet jelöl.)

Itt  $\overset{+}{\nabla}_i$ , ill.  $\bar{\nabla}_i$  a Penrose-féle differenciáló operátor a megfelelő előjellel vett  $\lambda_{ikl}$  taggal kiegészítve [2]:

$$\overset{+}{\nabla}_i \overset{+}{\Psi}_A = \frac{\partial \overset{+}{\Psi}_A}{\partial x^i} - \frac{1}{2} \sigma^{sA\dot{S}} \left[ \frac{\partial \sigma_{sA\dot{S}}}{\partial x^i} - \sigma_{pA\dot{S}} (\Gamma_{is}^p + \lambda_{is}^p) \right] \overset{+}{\Psi}_A. \quad (15)$$

A (13) és (14) neutrínó egyenletek lineárkombinációjával a klasszikus kétkomponensű neutrínó egyenlethez jutunk.

A következőkben javaslatot teszünk egy Lagrange-függvényre, melyből variációval a kérdéses neutrínó egyenleteket is lezármaztathatjuk.

A  $\lambda_{ikl}$  segítségével képezhető legegyszerűbb invariáns skalár nyilván:  $\lambda_{ikl} \lambda^{ikl}$ . E skalárhoz a következőképpen is eljuthatunk:



Határozzuk meg a következő tenzort:

$$\frac{1}{2} (\overset{+}{\nabla}_k \overset{+}{\nabla}_m - \overset{+}{\nabla}_m \overset{+}{\nabla}_k + \overset{-}{\nabla}_k \overset{-}{\nabla}_m - \overset{-}{\nabla}_m \overset{-}{\nabla}_k) v_i = v_l D^l{}_{ikm}. \quad (16)$$

Egyszerű számítással adódik, hogy

$$D_{likm} = R_{likm} + \lambda_{mli;k} - \lambda_{kli;m} + \lambda_m{}^t{}_i \lambda_{klt} - \lambda_k{}^t{}_i \lambda_{mli}. \quad (17)$$

Kontrakcióval kapjuk:

$$D^li{}_i = R + \lambda^{lmn} \lambda_{lmn}. \quad (18)$$

A gravitációs és az  $\varepsilon_{ik}$  térrel kölcsönható kétkomponensű spinorral leírható neutrínó Lagrange-függvényét a következő alakúra vehetjük (csak  $\overset{+}{\Psi}$  spinorra felírva):

$$\Lambda = -\frac{c^4}{16\pi\gamma} R + \kappa \lambda_{ikl} \lambda^{ikl} + \frac{1}{2} c \frac{\hbar}{i} \sigma^{iAA} (\overset{+}{\Psi}_A \overset{+}{\nabla}_i \overset{+}{\Psi}_A - \overset{+}{\Psi}_A \overset{+}{\nabla}_i \overset{+}{\Psi}_A), \quad (19)$$

ahol  $\kappa$  egy állandó.

A hatásintegrál:  $S = \int \Lambda \sqrt{-g} d\Omega$  és természetesen  $\delta S = 0$ .

Variálással a következő téregyenleteket kapjuk:

— a (13) neutrínó egyenletet, mely részletesen:

$$\frac{\hbar}{i} \left( \sigma^{iAA} \nabla_i \overset{+}{\Psi}_A + \frac{1}{4i} E^{iptl} \lambda_{ipt} \sigma_l{}^{AA} \overset{+}{\Psi}_A \right) = 0. \quad (13')$$

Itt  $E^{iklm}$  a teljesen antiszimmetrikus egység pszeudo tenzor. Ebből az egyenletből következik egyfajta töltésmegmaradás:

$$\frac{1}{\sqrt{-g}} \frac{\partial}{\partial x^i} (\sqrt{-g} \sigma^{iAA} \overset{+}{\Psi}_A \overset{+}{\Psi}_A) = 0, \quad (20)$$

— az  $\varepsilon_{ik}$  tenzor variálásával nyert téregyenlet a következő:

$$\nabla_l \left[ \frac{c\hbar}{8} \sigma_m{}^{AA} E^{iklm} \overset{+}{\Psi}_A \overset{+}{\Psi}_A - \kappa \lambda^{ikl} \right] = 0, \quad (21)$$

melyet kifejezőbb a következő alakban írni:

$$\frac{1}{\sqrt{-g}} \frac{\partial}{\partial x^l} \left[ \sqrt{-g} \left( \frac{c\hbar}{8} \sigma_m{}^{AA} E^{iklm} \overset{+}{\Psi}_A \overset{+}{\Psi}_A - \kappa \lambda^{ikl} \right) \right] = 0 \quad (21')$$

— a lokális bázisvektorok variálásával nyert egyenlet szimmetrikus része az Einstein-egyenlet:

$$\begin{aligned} \frac{c^4}{8\pi\gamma} \left( R_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} R \right) &= 6\kappa \lambda_{irs} \lambda_k{}^{rs} - \kappa \lambda_{prs} \lambda^{prs} g_{ik} + \\ &+ \frac{1}{4} c \frac{\hbar}{i} [\sigma_i{}^{AA} (\overset{+}{\Psi}_A \nabla_k \overset{+}{\Psi}_A - \overset{+}{\Psi}_A \nabla_k \overset{+}{\Psi}_A) + \sigma_k{}^{AA} (\overset{+}{\Psi}_A \nabla_i \overset{+}{\Psi}_A - \overset{+}{\Psi}_A \nabla_i \overset{+}{\Psi}_A)] - \\ &- \frac{3}{8} c \hbar \sigma_m{}^{AA} \overset{+}{\Psi}_A \overset{+}{\Psi}_A (E_i{}^{ism} \lambda_{kts} + E_k{}^{ism} \lambda_{its}). \end{aligned} \quad (22)$$



Az aszimmetrikus rész a következő alakú:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} c \frac{\hbar}{i} [\sigma_i^{AA} (\Psi_A^+ \nabla_k \Psi_A^+ - \Psi_A^+ \nabla_k \Psi_A^+) - \sigma_k^{AA} (\Psi_A^+ \nabla_i \Psi_A^+ - \Psi_A^+ \nabla_i \Psi_A^+)] + \\ & + \frac{1}{4} c \hbar E^{tik} \nabla_t (\sigma_s^{AA} \Psi_A^+ \Psi_A^+) - \\ & - \frac{3}{8} c \hbar \sigma_m^{AA} \Psi_A^+ \Psi_A^+ (E_i^{ism} \lambda_{kts} - E_k^{ism} \lambda_{its}) = 0. \end{aligned} \quad (23)$$

Az ilyen típusú neutrínó egyenletrendszer tárgyalható az Einstein-féle gravitációs tér nélkül is. Ekkor a Lagrange-függvényből el kell hagyni a  $-\frac{c^4}{16\pi\gamma} R$  tagot, és figyelembe kell venni, hogy Minkowski-féle téridőben a differenciáló operátorok a következőképpen hatnak:

$$\nabla_i^+ \Psi_A^+ = \frac{\partial}{\partial x^i} \Psi_A^+ + \frac{1}{2} \sigma^p_{A\bar{s}} \sigma^{t\bar{s}A} \lambda_{ipt} \Psi_A^+ \quad (24)$$

$$\bar{\nabla}_i \bar{\Psi}_A = \frac{\partial}{\partial x^i} \bar{\Psi}_A - \frac{1}{2} \sigma^p_{A\bar{s}} \sigma^{t\bar{s}A} \lambda_{ipt} \bar{\Psi}_A. \quad (25)$$

A továbbiakban a Lagrange-függvény már nem különbözik lényegesen pl. a Maxwell—Dirac-félétől, csupán a vektorpotenciállal leírt elektromágneses tér szerepét veszi át módosult formában az  $\varepsilon_{ik}$  tér. De ahhoz, hogy a (24), (25) összefüggések második tagjaihoz eljussunk, szükséges az Általános Relativitás.

Minkowski-téridőben a Lagrange-függvény a következőkre egyszerűsödik:

$$\begin{aligned} \Lambda = & \kappa \lambda_{ikl} \lambda^{ikl} + \frac{1}{2} c \frac{\hbar}{i} \sigma^{iAA} \left( \Psi_A^+ \frac{\partial}{\partial x^i} \Psi_A^+ - \Psi_A^+ \frac{\partial}{\partial x^i} \Psi_A^+ \right) - \\ & - \frac{3}{8} c \hbar E^{iklm} \sigma_m^{AA} \Psi_A^+ \Psi_A^+ \frac{\partial \varepsilon_{ik}}{\partial x^l}. \end{aligned} \quad (19')$$

Ehhez a következő téregyenletek tartoznak:

$$\frac{\hbar}{i} \left( \sigma^{iAA} \frac{\partial}{\partial x^i} \Psi_A^+ + \frac{1}{4i} E^{iptl} \sigma_t^{AA} \lambda_{ipt} \Psi_A^+ \right) = 0 \quad (13'')$$

$$\frac{\partial}{\partial x^l} \left( \frac{c\hbar}{8} \sigma_m^{AA} E^{iklm} \Psi_A^+ \Psi_A^+ - \kappa \lambda^{ikl} \right) = 0. \quad (21')$$

Valószínű, hogy a (19') Lagrange-függvény már kvantálható is (az első tag feltétlenül).

Mivel a (10), (11), (12) összefüggéseknek megfelelően 3 db differenciáló operátor létezik, így ezeknek 3 féle kétkomponensű neutrínó egyenlet, ill. 3 féle neutrínó felel meg. Bár ezek közül a neutrínó egyenletek közül csak kettő független, de az impulzusmomentum és a leptontöltés kvantáltsága és megmaradása miatt legalább két



neutrínó találkozására lenne szükség egy lineárkombináció kialakulásához, ami feltehetően igen valószínűtlen, így elképzelhető, hogy a természetben előforduló 3 féle neutrínó csak a neutrínó—neutrínó találkozás ritkasága miatt tűnik 3 független részecskének.

Természetesen a (13) Lagrange-függvényből adódó téregyenleteket nem tudom megoldani. Sokkal egyszerűbb a

$$A = -\frac{c^4}{16\pi\gamma} R + \kappa \lambda_{pts} \lambda^{pts} \quad (19'')$$

Lagrange-függvény egyenleteinek néhány megoldását megkeresni: Ha ui. az  $\varepsilon_{ik}$  tér létezik, akkor az csak valami nagyon kis gradiensű, mindenütt jelenlevő tér lehet, mivel észrevétlen. Ezért kézenfekvő e térnek kozmológiai értelmet tulajdonítani. Az  $\lambda_{ikl}$ -re vonatkozó téregyenletek most a következő alakúak:

$$\lambda^{ikl}_{;l} = 0 \quad (21'')$$

Az egyenlet a következőképpen teljesíthető:

$$\lambda^{ikl} = E^{iklm} \frac{\partial s}{\partial x^m} \quad (26)$$

( $s$  egy skálár).

Az Einstein-egyenletek a következő alakúak lesznek:

$$\frac{c^4}{8\pi\gamma} \left( R_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} R \right) = 12\kappa \frac{\partial s}{\partial x^i} \frac{\partial s}{\partial x^k} - 6\kappa \frac{\partial s}{\partial x^i} \frac{\partial s}{\partial x^p} g^{ip} g_{ik}. \quad (22')$$

Először tekintsük a (22') egyenletrendszer zárt izotróp világban! Ekkor [3, 4]

$$ds^2 = a^2 \left( \frac{x^4}{L} \right) \left[ dr^2 + L^2 \sin^2 \frac{r}{L} (d\zeta^2 + \sin^2 \zeta d\varphi^2) - (dx^4)^2 \right]. \quad (27)$$

A két független Einstein-egyenlet a következő:

$$\frac{c^4}{8\pi\gamma} \frac{1}{a^4} (-2\ddot{a}a + \dot{a}^2 - a^2) = 6\kappa \frac{1}{a^2} \dot{s}^2 \quad (22''/1)$$

$$\frac{c^4}{8\pi\gamma} \frac{3}{a^4} (-\dot{a}^2 - a^2) = -6\kappa \frac{1}{a^2} \dot{s}^2 \quad (22''/2)$$

Ezek megoldása:

$$a^2 = c_1 \cos 2 \frac{x^4 - x_0^4}{L} \quad (28)$$

$$s = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{c^4}{16\pi\gamma\kappa}} \operatorname{arth} \sin 2 \frac{x^4 - x_0^4}{L} + c_2. \quad (29)$$

A legegyszerűbb esetben az  $\varepsilon_{ik}$  tér el nem tűnő komponensei:

$$\varepsilon_{12} = -\varepsilon_{21} = \text{konstans} \cdot \sin^2 \frac{r}{L} \cos \zeta. \quad (30)$$

Másodszor tekintsük a (22') egyenletrendszer nyílt izotróp világban! Ekkor:

$$ds^2 = a^2 \left( \frac{x^4}{L} \right) \left[ dr^2 + L^2 sh^2 \frac{r}{L} (d\zeta^2 + \sin^2 \zeta d\varphi^2) - (dx^4)^2 \right]. \quad (27')$$

Az Einstein-egyenletek most a következők:

$$\frac{c^4}{8\pi\gamma} \frac{1}{a^4} (a^2 + \dot{a}^2 - 2a\ddot{a}) = 6\kappa \frac{1}{a^2} s^2 \quad (22''/1)$$

$$\frac{c^4}{8\pi\gamma} \frac{3}{a^4} (-\dot{a}^2 + a^2) = -6\kappa \frac{1}{a^2} s^2. \quad (22''/2)$$

Ezek megoldása:

$$a^2 = c_1 \operatorname{ch} 2 \frac{x^4 - x_0^4}{L} \quad (28')$$

$$s = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{-c^4}{16\pi\gamma\kappa}} \operatorname{arctg} sh 2 \frac{x^4 - x_0^4}{L} + c_2 \quad (29')$$

és az el nem tűnő  $\varepsilon_{ik}$  komponensek:

$$\varepsilon_{12} = -\varepsilon_{21} = \text{konstans} \cdot sh^2 \frac{r}{L} \cos \zeta \quad (30')$$

(itt  $\cdot$  jelöli a  $\frac{\partial}{\partial \frac{x^4}{L}}$  műveletet,  $c_1, c_2$  és  $x_0^4$  integrálási állandók).

Látható tehát, hogy a  $\lambda_{ik}$  tenzornak lehet kozmológiai értelmet tulajdonítani, mivel az ilyen jellegű téregyenleteknek van megoldásuk. Nem foglalkozom részletesen a (28), (29), ill. (28'), (29') megoldásokból levonható következményekkel, mivel azok az anyagi terek figyelembevételével változnának, csak megemlítem, hogy a vörösetlódás mindkét megoldás esetén felléphet.

A (13) Lagrange-függvényben a spinor-  $\varepsilon_{ik}$  tér kölcsönhatását leíró tagban a  $\lambda_{ikl}$  szerepét tekinthetjük a felirttól eltérően úgy is, hogy az a  $v_i = E_i^{prs} \lambda_{prs}$  pseudo-vektoron keresztül csatolódik a spinoráramhoz. A téregyenletek a leírtakkal majdnem azonosak lesznek, az eltérés csupán annyi, hogy ez utóbbi esetben páratlan számú koordináta tükrözéskor  $v_i$  előjelet vált. Ily módon bizonyos fajta tükröszimmetria-sértés magyarázhatóvá válik.

A különböző neutrínók létezésére itt adott magyarázat bár spekulatív, és kidolgozatlansága miatt csak minőségi képet nyújt, de logikailag igen elfogadhatónak látszik.

#### KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönettel tartozom Nagy Károly akadémikusnak, aki a  $\tau$ -neutrínók figyelembevételét javasolta.

#### IRODALOM

1. *Einstein*, Válogatott tanulmányok, Gondolat, Budapest, 1971.
2. *Perjés Zoltán*, Stacioner gravitációs terek tulajdonságai. Magyar Fizikai Folyóirat 24, 173, 1976.
3. *W. Weizel*, Fizikai képletgyűjtemény I. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1967.
4. *Landau, Lifsic*, Elméleti fizika II. Tankönyvkiadó, Budapest, 1976.



# ÚJABB EREDMÉNYEK ÉS LEHETŐSÉGEK A KVANTITATÍV SIMS VIZSGÁLATOKBAN\*

GIBER JÁNOS  
BME Fizikai Intézet

RIEDEL MIKLÓS  
ELTE Fizikai-Kémiai és Radiológiai Tanszék

SÓLYOM ANDRÁS  
BME Fizikai Intézet

A közlemény a szekunder ionemissziós tömegspektrometria kvantitatívításának kérdésével foglalkozik a több komponensű szilárd testek összetételének és koncentrációeloszlásának meghatározásával kapcsolatban az irodalom és a szerzők saját ezirányú munkái alapján. Megvizsgálja a kvantitatívítás kérdését, ezen belül azon faktorok szerepét, amelyek a SIMS esetén elsődleges jelentőségűek (ionoptika, energiaeloszlás, adszorpció). Összefoglalja és részletesen ismerteti azokat az elméleti és empirikus lehetőségeket, amelyek alapján a szekunder ion tömegspektrum kiértékelhető. Kiemelve tárgyalja a relatív módszereket (RSF, cluster ionok, kettős töltésű ionok alkalmazása), továbbá a plazma egyensúlyi szekunder ionemissziós elméleten alapuló LTE módszert, ill. az abban lehetséges módosítást. Reprezentatív kvantitatív analitikai adatok felhasználásával összehasonlítja a RSF és LTE módszerek alkalmazhatóságát, korlátaikat és kvantitatívításukat a nyomelemek és fő komponensek mennyiségi meghatározásában. Mindezek alapján értékelést ad a SIMS kvantitatívításáról.

A közlemény G. J.-nak a 3. International Sommer School on Vacuum Physics-en (Fonyód 1977) megtartott előadása és R. M. kandidátusi disszertációja alapján készült.

## 1. Bevezetés

A szekunder ionemissziós tömegspektrometria vagy közismert rövidítéssel a SIMS az utóbbi évtizedben elterjedt szilárdtest analitikai eszközzé vált: ma már szinte rutinszerűen használatos a felületi rétegek összetétele, a mélységi koncentrációeloszlás meghatározásánál, sőt a minták térfogatának mikroanalízisére is [1–6]. Az azonban nem kellően megvizsgált kérdés, hogy a szekunder ionemisszióval kapcsolatos eddigi empirikus és elméleti ismeretek alapján milyen mértékig várhatunk kvantitatív igényű adatokat egy SIMS vizsgálatról [7–12]. A közlemények java része a kvantitatívításon csupán az egyik vagy másik elmélet és a kísérleti adatok illeszthetőségének mértékét érti. Az analitikus feladata azonban egy ismeretlen összetételű minta összetételének minél nagyobb biztonsággal való visszaadása. Ebből a szempontból az egzakt elmélet tulajdonképpen másodlagos fontosságú. Elsődleges a könnyen kezelhető, zárt alakú elméleti vagy akár empirikus matematikai formula a koncentráció kiszámításához. E közleményben ezért nem a kísérleti adatoknak az elméletileg felállított ionemissziós modellek egyenleteihez való illeszthetőségével foglalkozunk, hanem a koncentrációmérés lehetőségével és annak pontosságával. E célból először összefoglaljuk a kvantitatívítás kérdését speciálisan a SIMS szempontjából, majd ismertetjük a kvantitatív analízishez használatos kiértékelési módszereket, végül konkrét mintaelemzéseket felhasználva összehasonlítjuk az ezen módszerek által nyújtott elemzési pontosságokat.

\* Érkezett 1978. dec. 6.



## 2. Kvantitatívítás a SIMS-nél

Mindenekelőtt azt szükséges megemlítenünk, hogy a SIMS mikroanalitikai eszköz, és réteganalízis is végezhető vele. Ennek megfelelően a kvantitatívítás nem csupán egy összetett mintában a koncentrációk megadásának, hanem az elemzett térfogatelem adatai ( $x$ ,  $y$ ,  $z$  koordináták) megadásának kérdése is. Ez utóbbi nyilvánvaló fontossága ellenére e munkában csak a koncentráció-meghatározás kvantitatívítását vizsgáljuk.

Egy kvantitatívnek tekintett analitikai módszertől azt kívánjuk, hogy a minta összetételét

- széles koncentrációhatárok között (nagy dinamikus tartomány)
- kis %-os hibával
- reprodukálhatóan

adja meg.

Ismeretes, hogy egy mérés hibái egyrészt a statisztikus hibákból, másrészt a mérés és kiértékelés módszeres hibáiból származnak. Az előbbieket két részre bonthatjuk:

- egy méréssorozaton belüli rövid idejű készülékingadozásokra,
- hosszú idejű ingadozásra (öregedés), változásra.

Ezek inkább mérés technikai kérdések, jellemzőek pl. minden tömegspektrométerre, ill. ionoptikai és jelátvivő rendszerre. A hibaforrások okait itt csak felsoroljuk: a primer ionforrás hibái (elektronika, gázadagolás); ionoptikák (elektronikus, geometriai), detektorrendszer (elektronikus, geometriai) ingadozásai; vákuumkörülmények megváltozásai. A hosszú távú hibák az elektronika öregedéséből (ez általában ellenőrizhető), geometriai torzulásokból (nem kontrollálható), elszennyeződés okozta memóriaeffektusból (a porlasztás miatt igen valószínűen nem kontrollálható) tevődnek össze [41].

A SIMS e technikai jellegű kérdéseivel itt részletesen nem foglalkozunk, de megjegyezzük, hogy az alább ismertetendő relatív módszerek egyik nagy előnye éppen az, hogy e hibák egy részét képesek csökkenteni, így a közepes és hosszú idejű ionoptikai, átviteli, detektor ingadozásokat.

A SIMS esetén is a hibák másik forrását a módszeres hibák jelentik, azaz azok, amelyek a porlasztásos ionképzés mechanizmusával állnak kapcsolatban. Ezeket három csoportba sorolhatjuk:

1. A különböző SIMS készülékek a szekunder ionok adott energiasávját juttatják a tömegszeparátorba [13, 14, 15], és ez berendezésenként és ionfajtánként is különböző lehet. Ez nem kizárólag technikai kérdés, a szekunder ionok képződési mechanizmusával is kapcsolatban van, ennek következtében különböző készülékek más-más ionhányadot detektálhatnak azonos minta analízisének.

2. A szekunder ionhozam erősen függ a berendezés pillanatnyi háttérgáznyomásától [16, 17, 18]. Ez ismét nem csupán technikai kérdés, hanem kapcsolatban van a szekunder ionképződés mechanizmusával is [28–37].

3. Hibaforrást jelent az is, hogy milyen kiértékelési módszert használunk arra, hogy a szekunder ionáramból a koncentrációt kiszámítsuk. Ez szorosan függ össze a szekunder ionemisszió mechanizmusának ismeretével.

Mindezek alapján első megítélésben úgy tűnik, hogy a szekunder ionemisszió egzakt elmélete elengedhetetlen ahhoz, hogy megbízható, reprodukálható és kellő



pontosságú számszerű koncentrációadatokat kapjunk egy szilárd test SIMS analízise kapcsán.

A SIMS-szel végzett analízis alapját, mint az közismert, a következő egyenlet adja [10, 24] (pl. a pozitív ionokra felírva):

$$I^+ = \eta \cdot S \cdot \beta^+ \cdot c \cdot I_p, \quad (1)$$

ahol  $I^+$  a detektált szekunder ionáram,  $\eta$  a tömegspektrométer transzmissziós koefficiense,  $S$  a porlasztási koefficiens,  $\beta^+$  az ionizációs hatásfok,  $I_p$  a bombázó primer ionáram és  $c$  a meghatározandó koncentráció. Azaz egy összetett szilárd testben egy komponens koncentrációja meghatározható lenne  $I^+$ -ből, ha a többi adatot ismernénk.

Erre elvben három lehetőség van:

1. Az (1) egyenletben szereplő egyes mennyiségek külön mérése (ismerete), és az abszolút adatokból történő számolás.
2. Az (1) egyenlet egyes tényezőinek elméleti úton való kiszámítása, és a koncentráció ennek segítségével történő meghatározása.
3. Egy mintán belül egy komponensre vonatkoztatott relatív adatokkal való számolás.

Az abszolút adatok felhasználása egyrészt bizonyos készülékparaméterek nagy-pontosságú ismeretét és stabilitását kívánja. A primer ionáram ( $I_p$ ) állandósága jól biztosítható, és közel sem annyira problematikus, mint a szikra ionforrásos gerjesztés állandósága. Ez az a technikai jellemző, ami miatt elektromos detektálás egyáltalán lehetséges, és az, ami a SIMS egyik jelentős technikai előnye. Az  $\eta$  meghatározása azonban kilátástalan, az általános tömegspektrometriás gyakorlatban sem teszik meg. Ennek oka az, hogy az átviteli hatásfokban az ionforrás, a tömegszeparáló és a detektor rendszer mindegyike tömeg ( $m$ ) diszkrimináló sajátosságú, és ez egzaktan nem ismeretes, csupán  $\eta = f(m)$  függvények empirikus felvétele lehetséges.

A szekunder ionemisszióra jellemző mennyiségek ( $S$  és  $\beta^+$ ) előre való meghatározása és ismerete tulajdonképpen nem látszik reménytelennek. A porlasztási koefficiens értéke valóban igen sok egykomponensű polikristályos anyagra és bombázó ionra kísérletileg ismert. Ezek hibája (az egyes szerzők adatainak szórása) körülbelül  $\pm 10$ – $20\%$  [19]. A porlasztás mechanizmusának elméleti ismerete is kielégítő *Sigmund* modelljével [20, 21].

Az analitikus feladata azonban összetett rendszerek vizsgálata, és az ezek porlasztására vonatkozó kísérleti anyag hiányos. Tény, hogy az egyes komponensek porlasztási koefficiense eltér tiszta anyagokétól [40]. Homogén ötvözeteknél a kisebb porlasztási koefficiensű anyag porlasztási sebessége feltehetően növekedik [22, 23], kétfázisú rendszerekben csökken [23]. Ennek egyelőre nem tisztázott volta az abszolút mérést kétséggé teszi.

Az abszolút mérés leg súlyosabb problémája azonban az, hogy  $\beta^+$  értéke tulajdonképpen még egykomponensű tiszta fémekre nem ismeretes. Abszolút értékét csak viszonylag kevés esetben mérték meg [25, 26, 27], és ezek elég nagy szórást mutatnak a kísérleti körülmények nem kellő definiáltsága miatt, nem beszélve arról, hogy ötvözetekre vonatkozóan egyáltalán nincs adat. A másik lehetőséget az ionizációfok elméleti úton történő kiszámítása jelentené. Ehhez azonban egyértelműen ismerni kellene az ionporlasztás során bekövetkező ionizációs folyamatot, ill. folyamatokat. A szekunder ionemisszió elméleti kidolgozása ma még nem elegendő ahhoz, hogy  $\beta^+$  minden esetben megadható legyen. Tulajdonképpen csak jól vagy kevésbé



jól közelítő modelleket állítottak fel, amelyek részizgazságokat, ill. részfolyamatokat jelentenek (*Andersen, Jurela, Krohn, Schroer, Sroubek, Cini, Antal, Rüdenauer, Gries, Joyes, Blaise* [28–37]).

Az pedig még kétségesebb, hogy ezek a modellek mennyiben érvényesek a híg és főleg a tömény ötvözetek esetén [38–40]. További hátránya az (1) egyenlet használatának az egyes tényezők hibájának akkumulálódása. Összességében megállapítható, hogy az abszolút adatokkal történő koncentrációsámítás módszere elvetendő.

A kvantitatív SIMS céljára azonban két másik módszer is kínálkozik a relatív érzékenységi faktorokkal (RSF-módszer), ill. az egyensúlyi plazma modell alapján (LTE-módszer) történő szekunderion tömegspektrum kiértékelés.

### 3. Relatív érzékenységi faktoral (RSF) történő koncentrációsámítás

Tekintsünk egy többkomponensű rendszert, amelyben

$$\sum_i c_i = 1. \quad (2)$$

Ha az (1) egyenletet a rendszer két komponensére írjuk fel, amelyek közül az egyik legyen a vonatkoztatási elem az összes többi komponens számára:

$$\frac{I_1^+}{I_2^+} = \frac{\eta_1 \cdot S_1 \cdot \beta_1^+ \cdot c_1 \cdot I_p}{\eta_2 \cdot S_2 \cdot \beta_2^+ \cdot c_2 \cdot I_p}. \quad (3)$$

Egyazon analízisben az  $I_p$  értelemszerűen azonos;  $\eta_1$  és  $\eta_2$  vagy azonosnak vehető, vagy a hányadosuk ionoptikai megfontolással számolható [11]. Az RSF-módszer nagy előnye máris nyilvánvaló: számos véletlen hiba megszűnik  $\eta$  és  $I_p$  elmaradásával.

Megkívánja viszont, hogy az

$$\frac{S_1 \beta_1^+}{S_2 \beta_2^+} = \frac{S_1^+}{S_2^+} \equiv \text{RSF} \quad (4)$$

menyiséget előre ismerjük a mintában szereplő összes összetevőre. A (4) egyenlettel definiált relatív érzékenységi faktor, RSF bevezetésével [8, 42] a SIMS analitika hasonlóan jár el tehát, az empirikus kalibrációt alkalmazó módszerekhez.

Az RSF-fel való munkánál tehát feltétel, hogy egy adott elemre (nyomelemzésnél célszerűen a fő elemre) vonatkoztatva ismerni kell minden szereplő elem RSF értékét. Az *I. táblázatban* számos elem sokkomponensű acél standardban meghatározott RSF értékét tüntettük fel saját méréseink [40] és olyan irodalmi közlések alapján, amelyeknél a mérési körülmények hasonlóak és jól definiáltak voltak.\* Látható, hogy a különböző szerzők által közölt adatok erős szórást mutatnak, 20–80%-os eltérések is vannak. Ennek okát annak tudhatjuk be, hogy az RSF döntően függhet:

- a vizsgált elem koncentrációjától [40],
- a mátrixtól, amelyben a vizsgált elem található, továbbá
- a minta felületének adszorpció állapotától.

\* A vizsgálatokhoz a hivatkozott szerzők részint olyan mintákat használtak, amelyekben vas melletti anyagok koncentrációja általában 1% alatti volt, részint pedig nagyobb koncentrációjú, kétkomponensű preparált ötvözeteket.



## I. TÁBLÁZAT

Különböző szerzők által acél mátrixokban meghatározott RSF értékek vasra vonatkoztatva

Elem	RSF				legnagyobb legkisebb hányados	Eltérés az átlagtól
Al	17,5	6,64	—	—	2,6	45%
Si	0,21	0,16	0,35	—	2,2	33%
Ti	17	5,83	—	—	2,9	49%
V	7,0	2,94	—	—	2,4	41%
Cr	6,1	3,85	2,50	4,9	2,4	42%
Mn	3,7	2,33	2,65	—	1,6	20%
Fe	1,00	1,00	1,00	1,00	—	—
Ni	0,41	0,24	0,21	0,44	2,1	35%
Co	0,75	0,64	—	—	1,2	8%
Cu	0,33	0,35	—	—	1,1	3%
Zn	8,0	0,80	—	—	10,1	82%
Mo	0,95	0,28	—	—	3,4	54%
szerző	[43]	[7]	[51]	[40]		

[43] J. M. Schroer. NBS 463, 464, 468 (gyengén ötvözött acél), 121 a (rozsdamentes acél) SIMS: AEI IM—20, 15 KeV  $O_2^+$ ,  $i_p = 20 \text{ mA/cm}^2$ ,  $10^{-5} \text{ Pa } O_2$ .

[7] D. H. Smith, W. H. Christie. NBS 661, 662, 663, 664, 665 (Fe 94—99,8%, főbb ötvözők Si, V, Cr, Mn, Ni max. 1%), SIMS: ARL, 15 KeV  $O_2^+$ ,  $10^{-4} \text{ Pa}$ .

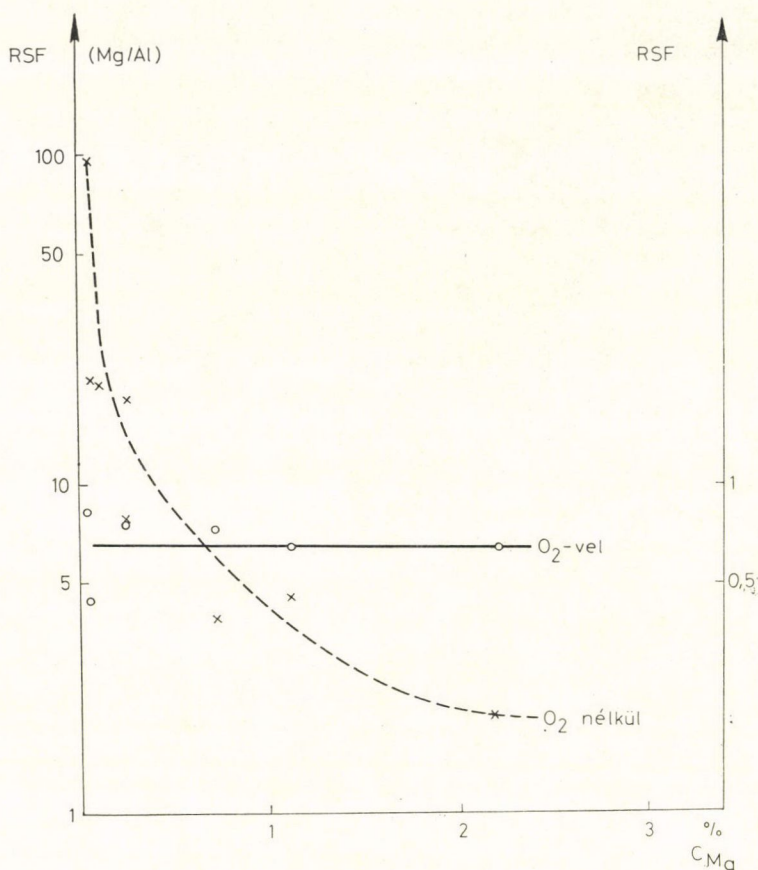
[51] V. Leroy, J. P. Servais, L. Habraken. Kétkomponensű preparált minták. SIMS: CAMECA,  $Ar^+$ ,  $i_p = 0,04 \text{ mA/cm}^2$ ,  $10^{-3} \text{ Pa } O_2$ .

[40] Riedel M. Kétkomponensű preparált minták. SIMS: saját építés,  $Kr^+$  4 KeV,  $i_p = 0,002 \text{ mA/cm}^2$ ,  $10^{-4} \text{ Pa}$ .

Vizsgáljuk meg tehát, milyen lehetőségek vannak a fenti paraméterektől való függés csökkentésére és így az analízis körülményeinek standardizálására.

A felület állapotának befolyása abban áll, hogy a reaktív gázok (elsősorban az oxigén) adszorpciója a felületre jelentősen megnöveli az egyes összetevő elemek ionizációfokát, és egyben megváltoztatja relatív értéküket is. Az erre vonatkozó kísérleteink és más szerzők munkáinak tanulsága szerint az oxigénadszorpció hatására a különböző elemek RSF-je egymáshoz és 1-hez közelít [40, 42, 43]. A felületi állapot befolyásának oka az ionemissziós mechanizmus megváltozása. Mindennek következményeként az RSF-módszerrel a reprodukálhatóság a kísérleti körülmények célszerű megválasztásával növelhető: a felület állapotának két szélső értéke (borítottság=0 vagy 1) valamelyikét kell stabilizálni [1, 3, 44—48].

A teljesen tiszta (borítottság:  $\Theta = 0$ ) felület UHV berendezésben vagy igen nagy primer ionáramsűrűségnél érhető el [45—48]. Ennek az eljárásnak az a hátránya a rutinanalízisnél, hogy a minta felülete általában eleve nem definiált. Másik lehetőség teljesen borított felület előállítása és fenntartása az analízis során. Ez két módon valósítható meg: oxigénion bombázással [49] vagy reaktív gáz hozzávezetéssel (reaktív SIMS [18, 50]). Ez esetben érzékenységnövekedéssel számolhatunk, a kristályorientációfüggés és a koncentrációfüggés jelentősen csökken [52—55]. Az oxigénhozzávezetés ez utóbbi előnyét mutatja be méréseink alapján az 1. ábra [55]. Kétségtelen ugyanakkor, hogy zavaró interferenciákat okozó oxigéntartalmú komplex ionok jelenhetnek meg a szekunder ion spektrumban.



1. ábra. Az RSF koncentrációfüggésének csökkenése oxigén-hozzávezetés hatására magnéziumtartalmú Al-ötvözetben [55]  
(Jobboldali tengely:  $O_2$ -vel)

Az RSF szigorúan akkor független a vizsgált elem koncentrációjától, ha sem  $S$ , sem  $\beta^+$  nem függ  $c$ -től. Ez azonban itt túlzott követelmény. A relatív értékek miatt elegendő, hogy  $S$  és  $\beta^+$  mindkét elemre azonosan változzék az illető elem koncentrációjával. Számos anyagra beigazolódott kísérletileg,  $c < 1\%$  esetén maga a szekunder ionhozam és ilyen esetben természetesen belőlük számított RSF is koncentrációfüggetlen. (Pl. Fe-Ni ötvözet [51, 53], ritkafémek [57], B, F, O Si-ben [58], F, H, C Si-ben [59] stb. ill. lásd a 2. ábrát: oxigén rézben [56]). Bizonyos egyszerű szerkezetű ötvözeteknél ez a linearitás nagyobb koncentráció ( $c$ ) tartományban is fennáll [26, 39, 40, 61], az ötvözet fázisváltozásánál azonban az ionáram és az RSF is megváltozhat [5].

A linearitás mértékét néhány irodalmi közlés alapján ítéltjük meg: *Ishizuka* szerint a standard deviáció nagy koncentrációknál 2–7%, kis koncentrációknál 0,5–3% [57], más szerzők szekunder ionemissziós méréseiből azonban lényegesen



nagyobb hiba adódik: *Evans* [56]  $\pm 20$ –25%, *Beske, Schelten* [26, 60] 50%, 5% *Newbury* [8] 10%.

Ismeretes, hogy a szekunder ionhozam erősen mátrixfüggő [9, 7, 24, 62]. *Morabito* szerint empirikusan [9] a mátrixfüggés a következőképpen írható fel:

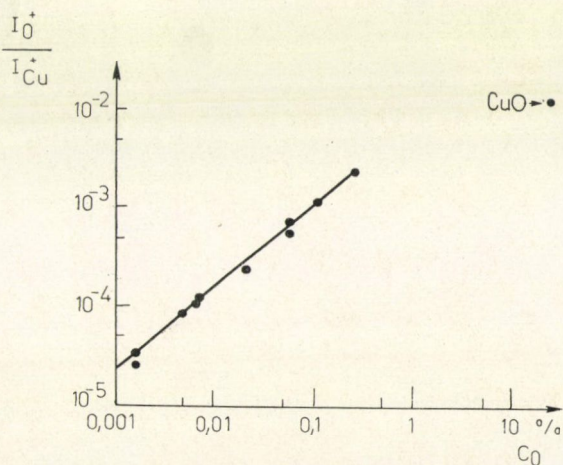
$$S_{\text{rel}, AB}^+ = \frac{S_A^+}{S_B^+} \cdot F_m, \quad (5)$$

## II. TÁBLÁZAT

Elemek vasra vonatkoztatott RSF-je  
két különböző típusú mátrixban  
(*Smith és Christie* adatai alapján [7])

Elem	RSF		$\frac{\text{nagyobb}}{\text{kisebb}}$ hányados	Eltérés az átlagtól
	acélban	üvegben		
B	0,15	0,18	1,2	9 %
Al	6,64	1,96	3,4	54 %
Si	0,16	0,53	3,3	54 %
P	0,005	0,032	6,4	73 %
Ti	5,83	1,90	3,1	51 %
Mn	2,33	1,72	1,4	15 %
Fe	1,000	1,000	—	—
Co	0,64	1,02	1,6	23 %
Cu	0,35	0,59	1,7	26 %
Zr	0,80	0,90	1,1	6 %
Ta	0,04	0,11	2,8	47 %
Pb	0,43	0,34	1,3	12 %

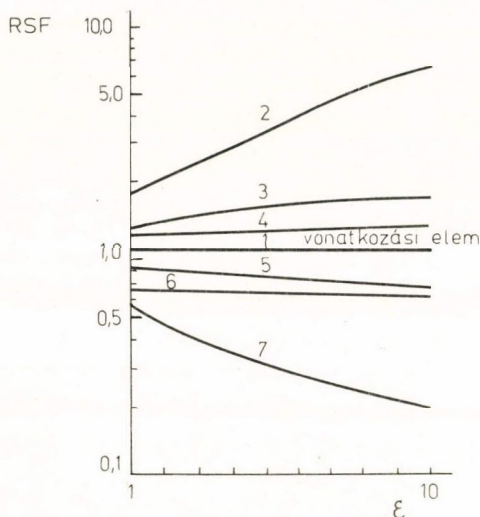
(Kísérleti körülményeket lásd az I. táblázatban.)



2. ábra. Az oxigén réz mátrixra vonatkoztatott relatív ionárama (azaz RSF-je) az oxigénkoncentráció függvényében (*Evans* nyomán [56])



ahol  $F_m$  fejezi ki az RSF mátrixfüggését. A mátrixeffektus tényéből következik, hogy eleve csak azonos típusú anyagoknál remélhető az azonos RSF használata. Példaként a II. táblázatban összehasonlítottuk azonos elemek acél és üveg mátrixban meghatározott RSF értékeit. Megállapítható, hogy az RSF bizonyos elemekre a két különböző mátrixban egymáshoz közelálló érték, más elemeknél viszont jelentős eltérés tapasztalható.



3. ábra. Különböző elemek (1, 2, 3, ...) RSF-je átszámolásának lehetősége fémes és szigetelő típusú mátrixok között *McHugh* javaslata szerint [42]. Az  $\epsilon$  növekvő értéke a fémes karakter növekedését jelenti

Az RSF értéke tehát függ az elektronszerkezettől, mint az elméletileg belátható, de a szekunder ionemisszió elméletei nem elégségesek arra, hogy egyértelműen kvantitatívan leírják ezt a változást. *McHugh* azonban javasol egy empirikus módszert, amellyel különböző anyag- (mátrix-) típusokban meghatározott RSF értékek a másikba, ill. tetszés szerinti fémes — szigetelő átmeneti típusú mátrixba átszámolhatók [42] (3. ábra). Az RSF eszerint folyamatos átmenetet mutat egy önkényes, a minta fémes, ill. szigetelő karakterének jellemzésére bevezetett paraméter ( $\epsilon$ ) függvényében. Ha két elemből ezt az  $\epsilon$ -t az adott mintára meghatározzuk, a görbesereg alapján elvben legalábbis minden elem RSF-je átszámítható az adott új mátrixra. Az egyszerűnek tűnő eljárást kísérletileg is valószínűsítettük tömény ötvözetek felületének fokozatos oxidációjakor számolható RSF adatokkal [40]. A mód-

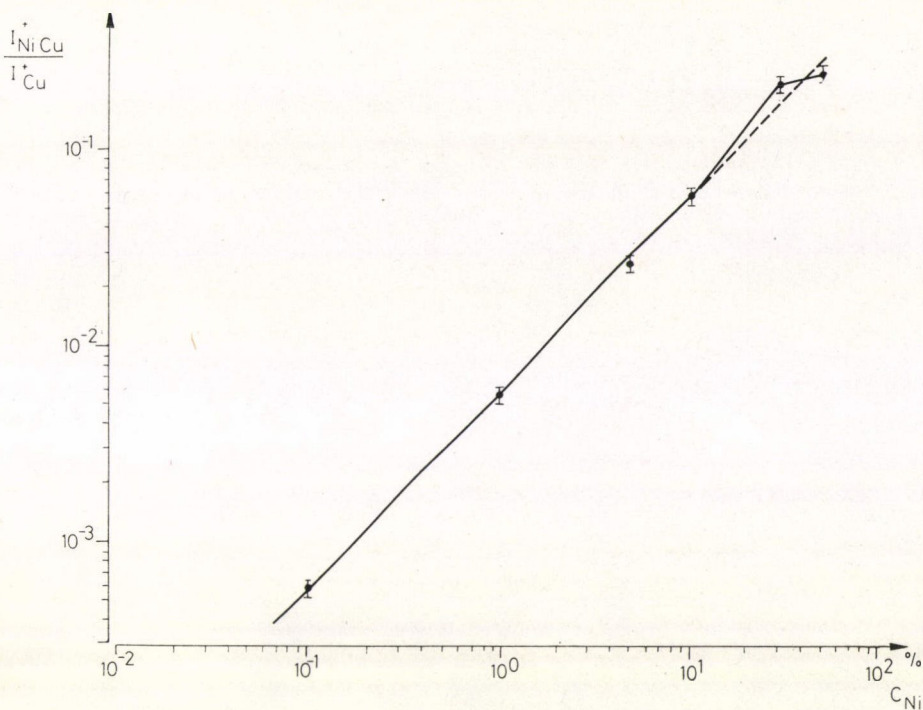
szer további gyakorlati igazolására, a pontossága, reprodukálhatósága felmérésére azonban további adatok kellenének.

A relatív módszerek nagy előnye, mint említettük, számos statisztikus és bizonyos módszeres hibák kiküszöbölésének lehetősége. A teljesség kedvéért ezért érdemes megemlítenünk, hogy az RSF módszeren kívül további két relatív koncentrációszámítási módszer is megvalósítható.

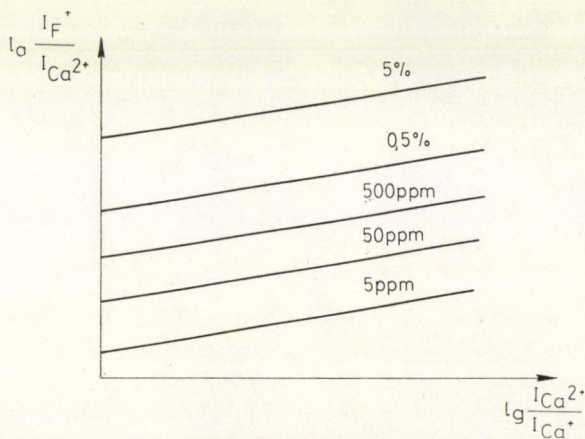
Koncentrációmérés új lehetősége adódik a cluster ionok relatív intenzitása alapján [40]. A kétatomos cluster (összetett) ionok intenzitása a koncentráció második hatványával arányos nem túl nagy koncentrációtartomány és feltehetően egyszerű szerkezetű összetett anyagok esetén [63, 64]. Ebből és az (1) egyenletről közvetlenül az atomos ionra vonatkoztatott relatív intenzitás egyenes arányossága miatt az adott elem koncentrációja kiszámolható, egyetlen, az RSF-fel analóg kalibrációs adat segítségével. Ezzel az eljárással részint csökkenthetők statisztikus hibák, részint lényeges, hogy nem szükséges belső vonatkoztató elem (4. ábra).

*Lodding* és munkatársai, valamint *Hinthorne* [62, 65] az esetleges kísérleti körülmények megváltoztatásából eredő technikai módszeres hibák csökkentésére egy ket-tős kalibrációs görbesereg felvételét javasolják. Ez tulajdonképpen kétszeres RSF meghatározást jelent egy mintában, úgy, hogy a vonatkoztatáskor használandó





4. ábra. Koncentrációmérés lehetősége heterogén clusterekkel:  
A  $NiCu^+$  clusterek relatív intenzitása egyenesen arányos a nikkel koncentrációjával  
(Rodriguez nyomán [64])



5. ábra. Kettős belső kalibráció módszere.  
(Lodding nyomán [62])

ionsúcsok számát megnöveli. Példaként az 5. ábra apatit minták a  $F^+/Ca^{2+}$ — $Ca^{2+}/Ca^+$  (kétszeres RSF) görbeseregét mutatja, amelyben a paraméter a fluor-koncentráció. E két módszer kétségkívül ígéretes a kvantitatív SIMS analitikában, bár eddig kellő számú kísérleti adat nincs részletesebb értékelésükhöz.

#### 4. A koncentráció kiszámítása az egyensúlyi plazma modell alapján (LTE módszer)

Az előbbieken már említettük, hogy az (1) egyenlet alkalmazásához  $\beta^+$  elméletileg (vagy kísérletileg) meghatározott értéke szükséges. Ezzel kapcsolatban két nehézséggel kell számolnunk:

1. A szekunder ionemisszió elméletei nem az ionizációs hatásfokot:

$$\beta^+ = \frac{n^+}{n_{\text{összes}}}, \quad (6)$$

hanem az ionizációfokot adják meg:

$$\alpha^+ = \frac{n^+}{n^0}, \quad (7)$$

ahol  $n$  a porlasztásban keletkező töltött, ill. semleges részecskék számát jelenti. Az viszont nem tételezhető fel minden esetben, hogy  $n_{\text{összes}} = n^0$ , mivel általában

$$n_{\text{összes}} = n^0 + n^+ + n^- + \sum n_{\text{molekulák}}. \quad (8)$$

2. Az  $\alpha^+$  elméleti megadása sem megnyugtatóan megoldott, mint említettük, az emissziós modellek körülményes számolása, a sok nem ismert paraméter következtében, és végül, mert nincs adekvát modell a szekunder ionemisszióra.

Az emissziós modellek egyike, az LTE modell (Andersen [28, 66]) azonban az elméleti egzaktág rovására önkényesnek nevezhető paraméterek bevezetésével [12] alkalmasnak mutatkozik a gyakorlati analitika számára. Az első problémát úgy oldja meg, hogy figyelembe veszi a pozitív, negatív, semleges porlasztott részecskék és a monoxid, dioxid molekulák létét a plazma egyensúlyban. Így:

$$n_m = \frac{n_{m^+}}{n_m^+/n_m^0} \left[ \left( 1 + \frac{n_m^+}{n_m^0} + \frac{n_m^-}{n_m^0} \right) \left( 1 + \frac{n_0^0}{K_1} + \frac{(n_0^0)^2}{K_1 \cdot K_2} \right) \right], \quad (9)$$

ahol

$$n_m \sim c \quad (10a)$$

$$n_m^+/n_m^0 \sim \alpha^+ \quad (10b)$$

$$n_m^+ \sim I^+ \quad (10c)$$

és  $K$ -k az egyensúlyi állandók.

A második kérdés megoldása a plazma egyensúly feltételezése, amelyből következik, hogy az ionizáció foka a Saha—Eggert-egyenlettel számolható:

$$\alpha^+ \sim \frac{n_m^+}{n_m^0} = \frac{1}{n_e} \frac{Q^+(T)}{Q^0(T)} \cdot \frac{(2\pi m_e kT)^{1/2}}{h^3} \exp \frac{(-eI - \Delta E)}{kT}, \quad (11)$$



amelyben  $h$  a Planck-,  $k$  a Boltzman-állandó,  $I$  az illető elem ionizációs potenciálja, továbbá  $Q$ -k az állapotösszegek,  $m_e$  az elektron tömege,  $\Delta E$  az ionizációs energia csökkenése a plazmában. Az egyenletben két kritikus mennyiség szerepel: a plazma hőmérséklete ( $T$ ) és elektronsűrűsége ( $n_e$ ). Ezek azonban, ha a (11) egyenletet a szekunder ionemisszióra alkalmazzuk, nem tartalmazhatnak konkrét fizikai jelentést. Ez magától értetődő, ha figyelembe vesszük, hogy a porlasztás során keletkező részecskék nagy energiája miatt az egyensúly beálltának nincs meg a lehetősége [12, 67, 68, 69]. Problematikus a plazma modellben továbbá, hogy elvben legalábbis nem képes a mátrixhatás figyelembevételére. Újabb vizsgálatok szerint a mátrix minősége empirikusan a  $T$  értékében mutakozhat meg [40, 72].

A számolás menete tehát a következő: táblázati adatok és a mért ionáramok segítségével két belső standardnak választott elem ismert koncentrációjából e két paraméter ( $T$  és  $n_e$ ) meghatározandó (illesztés), majd tovább alkalmazva a (9) és (11) egyenleteket az összesített minta többi alkotójának koncentrációja kiszámítható a részecskeszámok segítségével. Vagyis tulajdonképpen az ionáram korrekcióját végezzük el az összes lehetséges ionfajtára (*Andersen, Shimizu* [66, 70]). Több elemre végzett illesztés természetesen jobb eredményt kell adjon (*Shimizu*) [70], de ez analitikailag értelmetlen.

Az LTE módszerrel történő spektrum kiértékelésnél a gyakorlatban két nehézséggel kell számolnunk:

- a belső standard igénnyel és
- a viszonylag komplikált számítási eljárással, amely számítógép felhasználását kívánja meg.

Ezért az LTE módszer egyszerűsítésére már számos próbálkozás történt. A belső standardok számának csökkentésére az alábbi lehetőségek kínálkoznak:

- a kettős töltésű ionok is felhasználhatók a számításhoz (*Rüdenauer* [67, 71])
- empirikus összefüggést ismertek fel  $T$  és  $n_e$  között (*Andersen* [66])
- $T$ -t kísérletileg más mátrixokon meg lehet határozni (*Morgan* [72]), és az így meghatározott  $T$  feltehetően használható hasonló ötvözetek spektruma kiértékelésénél is. A legfontosabb egyszerűsítési lehetőség természetesen az, hogy egy ötvözetben (ill. általában egy sokkomponensű rendszerben) a komponensek koncentrációinak összege 1 ((3) egyenlet), vagyis nyomszennyező analízis esetén a mátrix koncentrációját 1-nek tekinthetjük.

A számítás komplikáltságának további csökkentése azáltal lehet, hogy a (8) egyenletből melyik részecskefajta részvételét tekintjük elhanyagolhatónak (*Morgan* [73], *Simons* [74], *Rüdenauer* [67], *Schroeder* [43]):

- molekuláris ionokét, ha a disszociációs energia kicsi,
- negatív ionokét, kis elektronaffinitású anyagoknál.

Ezek figyelembevételével két komponens ( $A$  és  $B$ ) relatív ionárama a következő összefüggéssel írható fel:

$$I_{\text{rel}} = \frac{c_A}{c_B} \frac{(1 + I^+/I^0)_B}{(1 + I^+/I^0)_A} Q_{\text{rel}}(T) \exp \frac{eI_A - eI_B}{kT}. \quad (12)$$

Ebben ismeretlen a  $T$  mellett a semleges porlasztott részecskék árama és  $c_B$ , de további egyszerűsítések is kínálkoznak: a (2) egyenlet használata, az  $I^+/I^0$  tag elhanyagolása kis ionizációfokú elemeknél, az állapotösszegek szerepének figyelmen



kívül hagyása (*Morgan* [73, 75], *Rüdenauer* [67]). Mindezek azonban az egyszerűsödés mellett mindinkább csökkentik az eredeti LTE módszer korrekciós lehetőségeit, és végül is tulajdonképpen az LTE módszernek az RSF módszerbe való átmenetét jelentik (egyszerűsített jelöléssel):

$$c_{\text{rel}} \sim I_{\text{rel}}^+ \cdot Q_{\text{rel}} \cdot \exp_{\text{rel}}$$

$$c_{\text{rel}} \sim I_{\text{rel}}^+ \cdot Q_{\text{rel}} \quad (13)$$

$$c_{\text{rel}} \sim I_{\text{rel}}^+.$$

### 5. Az RSF és LTE módszerek összehasonlító értékelése [40]

Az előbbi áttekintés alapján tehát azt a megállapítást tehetjük, hogy jelenlegi formájában két kipróbált és bevált kiértékelési módszer lehetséges a kvantitatív SIMS számára: az RSF alkalmazása, ill. LTE valamelyik változatával történő koncentráció számolás. Az analitikai gyakorlat szempontjából célszerű összehasonlítani a két módszert arra vonatkozóan, hogy egyrészt milyen feltételek mellett használhatóak, másrészt milyen módszeres hibát okoz alkalmazásuk.

Először is hasonlítsuk össze milyen feltételek szükségesek a módszerek alkalmazásához:

a) RSF: az RSF meghatározása hasonló mintában, belső standard nem kell, bármilyen minőségű ionbombázásnál alkalmazható, a háttérgáz befolyása kritikus, stabilizálандó, a számítás egyszerű, irodalmi adatokat nem igényel.

b) LTE: 1 vagy 2 ismert koncentrációjú belső standard szükséges, etalon minta nem kell, reaktív ion bombázásnál alkalmazható elsősorban. A háttérgáz befolyása nem kritikus, a számítás körülményes, irodalmi adatokat igényel.

A továbbiakban összehasonlítjuk az LTE eredeti, nem egyszerűsített változatát az RSF módszerrel a koncentrációmeghatározás pontossága szempontjából. Ezt az irodalomban közölt kísérleti adatok alapján végeztük; olyan kvantitatív analitikai adatokat használtunk fel, amelyek:

- azonos típusú mátrixokat vizsgáltak (acélok, oxidok),
- kellő számú mérési adatot közöltek (hogy a statisztika megfelelő legyen),
- a kísérleti körülményeket kellően definiáltnak tekinthettük, és egyben oxigénnel teljesen borított felülettel számolhattunk. Ilyen jól definiált méréssorozatnak tekinthettük az RSF-fel történő kiértékelésre *Newbury* [8] és *Leroy* [51], az LTE módszerhez *Andersen* [66] és *Lovering* [76] munkáit.

Az említett két módszer használhatóságát olyan szempontok szerint vizsgáltuk, amelyeket a kvantitatív analitika támaszt a hiba mértékével, a reprodukálhatósággal és általános alkalmazhatósággal szemben:

1. Hogyan képes visszaadni az ismert koncentrációt a módszer a tömegspektrum alapján. Ezt az RSF esetén külön üveg és acél mátrixokban az ott érvényes RSF-fel számolva, az LTE-nél acél, sárgaréz, oxid mátrixokban együttesen vizsgáljuk. (Ez utóbbiakban a módszer szempontjából nem lévén elvi különbség a mátrixok között.)

2. Különböző laboratóriumokban az analízis mennyire ad reprodukálható eredményt az RSF és az LTE alkalmazásakor ugyanazon minta vizsgálatánál.



A módszerek értékelésére az irodalomban található két, ez irányú közlemény (Smith, Newbury [7, 8]) a módszerek használhatóságát a

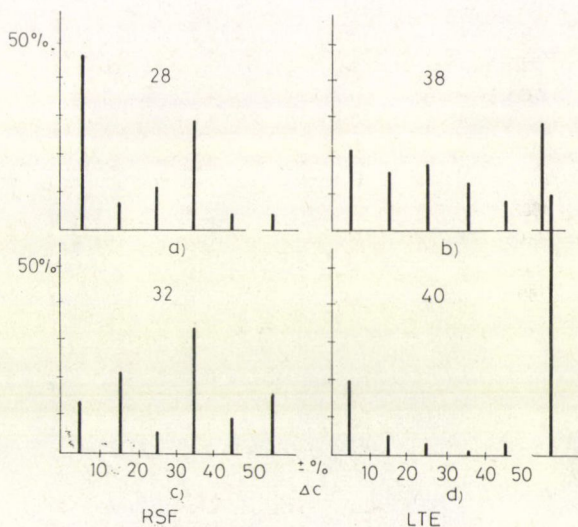
$$\frac{\text{mért koncentráció}}{\text{valódi koncentráció}}$$

tört értékének 1 körüli szórásával jellemzi.

Véleményünk szerint azonban az analitikai gyakorlat számára sokkal többet mond az a kritérium, hogy a mért koncentráció hány % eltérést mutat a feltételezett (vagy ismert) valódi koncentrációtól. Ez jelenti a mérés és kiértékelés szisztematikus hibáját:

$$\Delta c = \frac{c_{\text{mért}} - c_{\text{valódi}}}{c_{\text{valódi}}} \quad (14)$$

Ennek megfelelően az említett reprezentatív irodalmi adatok alapján elkészítettük a kiértékelési módszerek hiba hisztogramját (6. ábra). A vízszintes tengelyen a koncentrációmeghatározás %-os hibáját ( $\Delta c$ ), a függőleges tengelyen az adott hibatartományba eső előfordulások mennyiségét vettük fel az összes vizsgált eset százalékában.



6. ábra. AZ RSF és LTE módszerek hibahisztogramja  
(Az ábrák fölött a vizsgált esetek száma)

A 6a ábrán az RSF módszer szisztematikus hibaeloszlása látható. A hisztogramhoz két különböző típusú mátrix analízisének adatait használtuk fel:

RSF üvegeken (oxidos típusú anyag) (előre ismert RSF értékkel),

RSF acélokon (előre ismert RSF értékkel).

Megállapítható, hogy az átlagos hiba 25–30% körül van. A 6b ábra az LTE módszer koncentrációmeghatározási képességére jellemző; a hisztogram diszperz, jellemzője az, hogy az átlagos hiba az RSF-hez hasonló, de igen nagy százalékban vannak kiugróan rossz analízisadatok is ( $\Delta c > 50\%$ ).



A 6c ábra és a 6d ábra ugyanazon minták (standardok) különböző laboratóriumokban végzett analíziseinek eredményeit hasonlítja össze. Az előző két ábrával összehasonlítva megállapítható, hogy a hiba mértéke mindkét módszer használatánál is jelentősen megnövekedik.

### III. TÁBLÁZAT

Az RSF-fel és LTE-vel végzett kiértékelés esetén a félkvantitatívnak tekinthető (< 20%) és a rossz (> 50%) analitikai eredmények százalékos mennyisége

Módszer, körülmény	Esetek száma	hiba		Felhasznált közlémények
		< 20 %	> 50 %	
1. RSF különböző anyagokban	28	64 %	4 %	[8, 51]
2. LTE különböző anyagokon	38	55 %	29 %	[66]
3. RSF különböző laboratóriumokban	32	41 %	16 %	[8]
4. LTE különböző laboratóriumokban	40	28 %	60 %	[76]

A III. táblázatban összefoglalóan azt tüntettük fel, hogy a 4 különböző vizsgált esetben a mért adatok hibája az esetek hány %-ában van 20% alatt (amit a fél-kvantitatív analitika határának tekinthetünk), ill. 50% fölött (amivel viszont a teljesen hibás eredményeket jellemeztük). A hisztogramokból és a táblázatból azt a megállapítást tehetjük, hogy a 20% határ szempontjából a két módszer kb. azonos értékű. Ezzel szemben az 50% feletti eseteket tekintve kitűnik, hogy az LTE igen nagy számban ad kirívóan rossz eredményt. Értékelésünkhöz hasonló következtetésre jutott legújabban *Newbury* és *Smith* [7, 8] is, bizonyos anyagok saját méréssel történő értékelése kapcsán.

Bár az előzőek is érdekes információkat jelenthetnek, az analitikus szempontjából, a hiba abszolút értéke nem esik azonos mértékkel latba a minta különböző koncentráció tartományban jelenlevő elemeinél. Nagy koncentrációknál kisebb, kis koncentrációknál nagyobb hiba engedhető meg. (Egészen kis koncentrációknál pl. már egy nagyságrendi becslés is értékes kvantitatív adat lehet.) Ez további értékelési szempontot ad a SIMS spektrumok RSF-fel, ill. LTE-vel történő kiértékeléséhez.

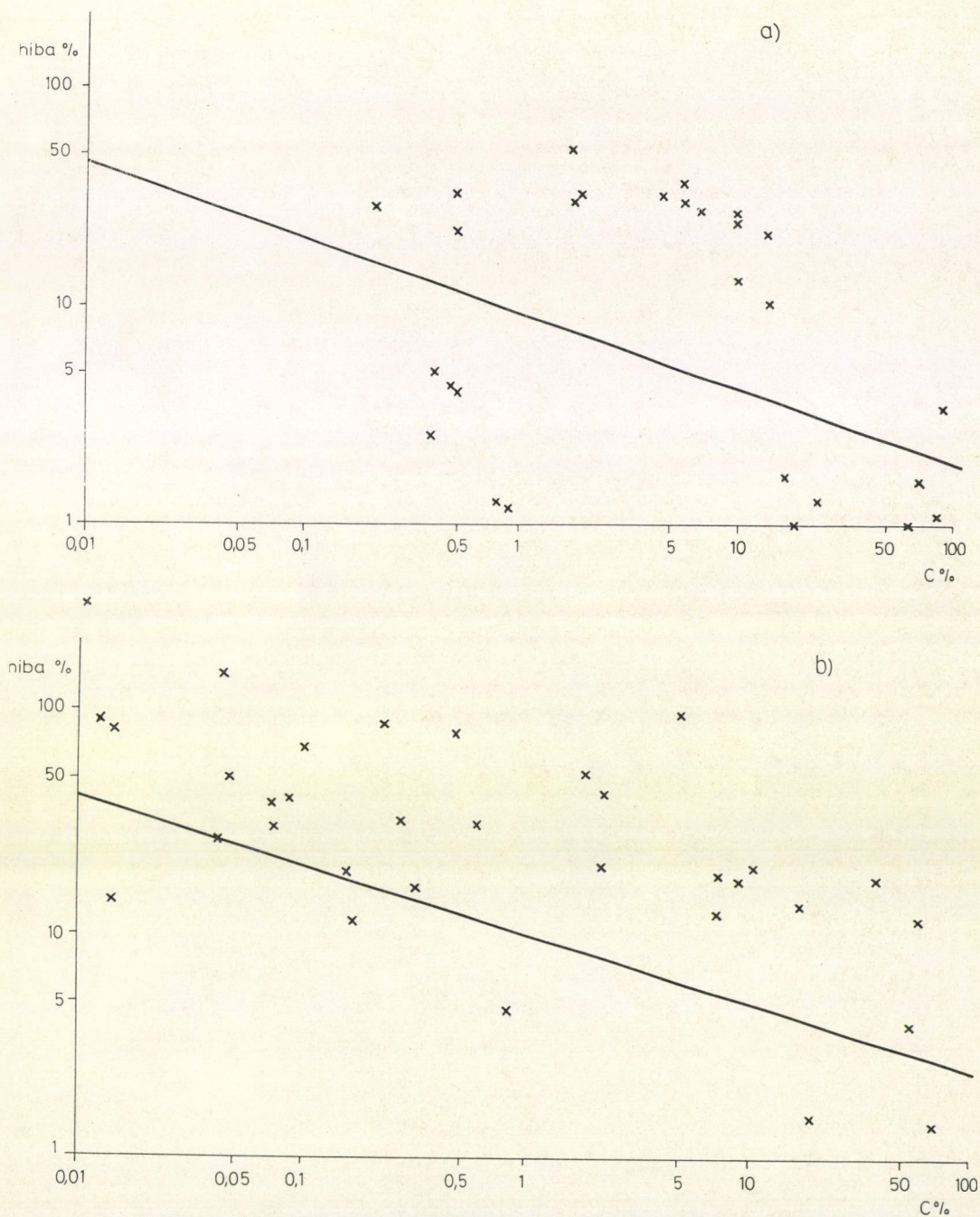
Ilyen értelmű összehasonlításhoz, bizonyos önkényességgel ugyan, ésszerű megengedhető hibahatárokat jelöltünk meg az egyes koncentráció nagyságrendeknél. Eszerint

$c = 100-10\%$	között	$\pm 2-5\%$
10-1		5-10
1-0,1		10-20
0,1-0,01		20-50 hibát

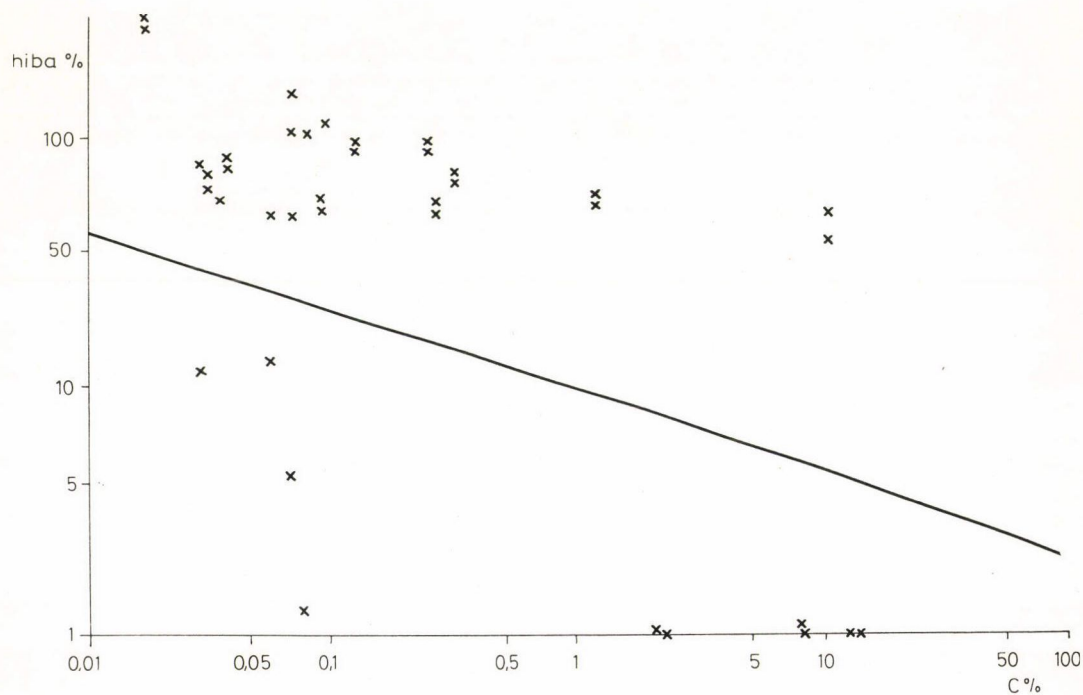
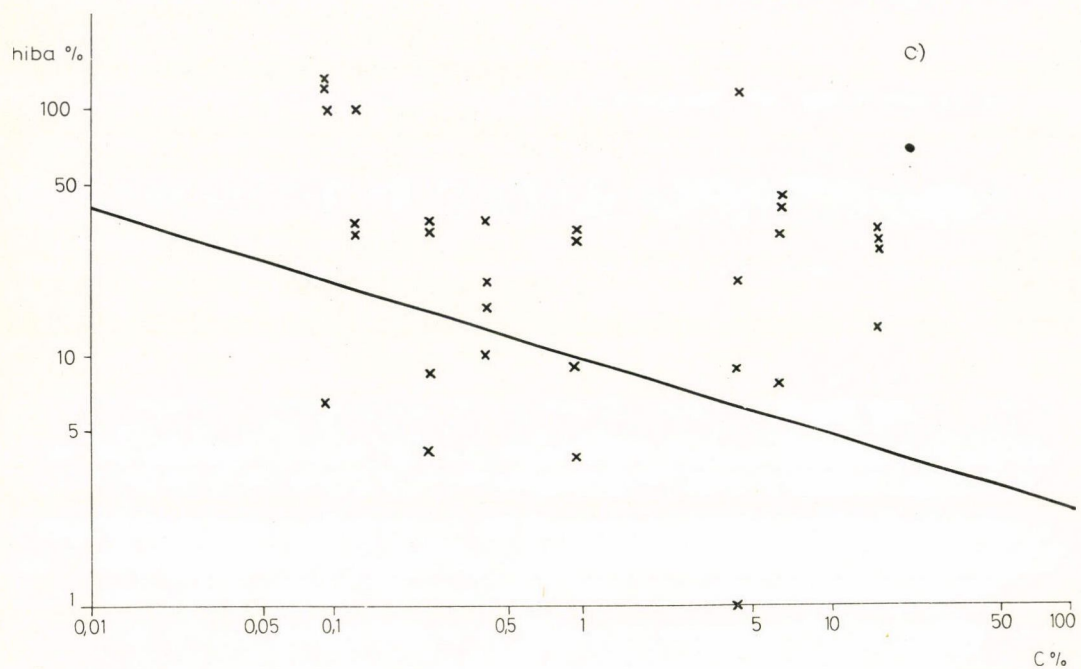
tekintettünk megengedhetőnek egy kvantitatív igényű munkánál.

A 7a-d ábrákon az előzőekben is felhasznált koncentrációadatok hibáinak abszolút értékét tüntettük fel a mintában levő valódi koncentráció függvényében. Az ábrákon bejelöltük az előzőekben kijelölt hibahatárokat is. Az egyes tartományokban jónak tekinthető (vonal alatti) eredmények %-os mennyiségét a IV. táblázat





7. ábra. Az RSF és LTE módszerek szolgáltatott koncentrációadatok hibája a komponensek mintában levő koncentrációja függvényében. (A folyamatos vonal a megengedettnek tekintett maximális hibát jelzi.) a) RSF, b) LTE,



7. ábra. c) és d) RSF és LTE eredmények különböző laboratóriumokban



foglalja össze. A táblázat összeállításánál figyelembe vettük, hogy a nagy koncentrációknál az LTE természetszerűen kell, hogy jó eredményt adjon, hiszen e tartományban vannak a belső standardként választott és így maximális pontossággal illesztett koncentrációadatok. Látható, hogy a két módszer között az eltérés, ha nem is nagyon szignifikáns, de az 1—10% tartományban az LTE az 1—100% és a 0,1—1% tartományban az RSF látszik jobb eredményeket adni.

## IV. TÁBLÁZAT

A kijelölt hibahatár alatti analíziseredmények hányada  
a különböző koncentráció-intervallumokban

Módszer, körülmény (vö. III. táblázattal)	Koncentrációtartomány, %				Felhasznált munkák
	10—100	1—10	0,1—1	0,01—0,1	
	hiba- határ %	2—5	5—10	10—20	20—50
RSF 1	66 %	0 %	67 %	—	[8, 51] [8]
3	0 %	25 %	30 %	25 %	
LTE 2	28 %	13 %	30 %	38 %	[66] [76]
4	0 %	50 %	0 %	24 %	

Az értékelésből megállapítható, hogy az RSF értékek átvihetők hasonló típusú mátrixba (pl. üveg üvegbe, acél acélba) úgy, hogy az eredmények hibája nem változik meg észrevehetően. A különböző laboratóriumok eredményei szempontjából az RSF és az LTE hasonló eredményt ad. Legfontosabb megállapításunk azonban az, hogy mindkét kiértékelési módszerrel is, a SIMS csak félkvantitatív adatokat adhat a koncentrációmérésnél. A III. táblázat adatai alapján látszik, hogy 20% alatti adatok %-os mennyisége kicsi. Az 50% alatti hibájú mérések mennyisége (ezeket még elfogadhatjuk félkvantitatív adatoknak) az RSF-nél lényegesen kisebb, mint az LTE-s kiértékelésnél.

Az RSF módszer valószínűleg jobb eredményt ad, ha a (13) egyenletek szerinti korrekciókat is alkalmazzuk az  $I^+$  adatok kiértékelésénél (*Morgan* [75]). Ez azonban a számolást teszi már körülményesebbé, és egyben esetleg nem ismert vagy nem kellő pontossággal ismert mennyiségek felhasználását is megkívánja ( $Q(T)$ ,  $E_i$ ). Az LTE hibája ugyanakkor csökkenthető lenne több belső standard alkalmazásával (*Shimizu* [7]), ill. ugyancsak a (13) egyenletek szerint egyszerűsítések fokozatos alkalmazásával *Rüdenauer* [67]). Ezzel tulajdonképpen két irányból közelítjük a két módszer közötti átmenetet, és ez bizonyos előnyökkel (pontosságnövekedés, számításegyszerűsödés) járhat. Az optimum megtalálása azonban részletesebb vizsgálatokat kíván még.

Összefoglalva végül azonban fontos hangsúlyoznunk, hogy a SIMS bár csak félkvantitatív analitikai módszernek tekinthető, és *Rüdenauer*hez [11, 67] hasonlóan feltételezhetjük, hogy a kvantitatív határát (kb. 1%), amelyet az összehasonlító módszerként gyakran említett elektronmikroszkop is elér, a SIMS nem valószínű, hogy képes lesz nyújtani, a szolgáltatott információk együttese azonban a SIMS-et igen értékes szilárd test analitikai eszközzé teszi.



## IRODALOM

1. C. A. Evans, Anal. Chem. 44, 67 A, 1973.
2. R. E. Honig, Adv. in Mass Spectry. 6, 337, 1974.
3. M. Riedel, B. Perović, Boris Kidrič Inst. Publ. № 1349, 1975, Beograd—Vinča.
4. Riedel M., A szekunder ionizációs tömegspektrometria. A kémia újabb eredményei 45 kt. Akadémiai Kiadó, 1979.
5. V. T. Cserepin, M. A. Vasziljev, Vtoricsno ionno-ionnaja emisszija metallov i szplavov. Naukova Dumka, Kiev, 1975.
6. K. F. J. Heinrich, D. N. Newbury, Secondary Ion Mass Spectrometry. NBC. Spec. Publ. № 427, 1975.
7. D. H. Smith, W. H. Christie, J. Mass Spectr. 26, 61, 1978.
8. D. N. Newbury, kézirat (NBS, Washington).
9. J. M. Morabito, R. L. Lewis, Anal. Chem. 45, 869, 1973.
10. H. W. Werner, Vacuum 22, 613, 1973.
11. F. G. Rüdenauer, J. Mass Spectr. 6, 309, 1971.
12. H. W. Werner, Vacuum 24, 493, 1975.
13. T. Ishitani, H. Tamura, T. Shimizu, Surf. Sci. 55, 179, 1976.
14. G. Blaise, G. Slodzian, J. Phys. Appl. 8, 247, 1973.
15. J. Jurela, J. Mass Spectr. 18, 101, 1975.
16. H. E. Beske, Int. Conf. on Ion-Solid Interaction, Garching, 1973.
17. G. Slodzian, J.—F. Hennequin, Compt. Rend. 263 B, 1246, 1966.
18. J. Giber, Thin Solid Films, 32, 295, 1976.
19. J. Antal, közlésre előkészítve.
20. P. Sigmund, Phys. Rev. 184, 383, 1969.
21. P. Sigmund, Rev. Roumanie Phys. 16, 1079, 1972.
22. G. K. Werner, 2. Coll. Int. sur Pulverisation Catodique Nice, 1976.
23. S. D. Dahlgreen, E. D. Mc Clanahan, J. Appl. Phys. 43, 1514, 1972.
24. H. W. Werner, H. A. M. de Grefte, Surf. Sci. 35, 458, 1973.
25. J.-F. Hennequin, J. Phys. (Paris) 29, 957, 1968.
26. H. E. Beske, Z. Naturforsch. 22a, 459, 1967.
27. A. Benninghoven, Surf. Sci. 35, 427, 1973.
28. C. A. Andersen, J. R. Hinthorne, Science 175, 853, 1972.
29. J. Jurela, J. Mass Spectr. 12, 33, 1973.
30. V. E. Krohn, J. Mass. Spectr. 22, 43, 1976.
31. J. M. Schroeer, Surf. Sci. 35, 485, 1973.
32. J. Sroubek, Surf. Sci. 44, 47, 1974.
33. M. Cini, Surf. Sci. 54, 71, 1976.
34. J. Antal, Phys. Lett. 55 A, 493, 1976.
35. W. H. Gries, F. G. Rüdenauer, J. Mass Spectr. 18, 111, 1975.
36. P. Joyes, J. Phys. C. 5, 2192, 1972.
37. G. Blaise, Rad. Eff. 18, 235, 1973.
38. T. Narusawa, T. Satake, S. Komija, J. Vac. Sci. Tech. 13, 514, 1976.
39. H. Rodriguez-Murcia, H. E. Beske, Ber. der Kernforsch. Jülich. Jül. 1292, 1976.
40. Riedel M., Kandidátusi értekezés, 1978.
41. H. E. Beske, in: Quantitative Analysis with Electron Microprobes and SIMS. Ed by E. Preuss, Jülich 1972, p. 249.
42. J. A. McHugh, in: [6] p. 129.
43. J. M. Schroeer, J. Vac. Sci. Techn. 14, 1977.
44. V. F. Rübalko, Ja. M. Fogel, V. Ja Kolot, Zs. Fiz. Him. 43, 955, 1969.
45. A. Benninghoven, Z. Phys. 230, 403, 1970.
46. H. E. Beske, H. Holzberger, J. Mass. Spectr. 7, 111, 1971.
47. H. Liebl, R. F. K. Herzog, J. Appl. Phys. 34, 2893, 1963.
48. Ja. M. Fogel, Uszp. Fiz. Nauk. 91, 75, 1967.
49. C. A. Andersen, J. Mass Spectr. 2, 61, 1969.
50. H. W. Werner, in: Developments in Appl. Spectry. Ed. by E. L. Grove, A. J. Perkins, Plenum Press 7 A, 239, 1969.
51. V. Leroy, J. P. Servais, L. Habraken, C. R. M. Rep. (Liege) № 35, 69, 1973.
52. A. Benninghoven, A. Müller, Phys. Lett. A 40, 169, 1972.
53. F. Konishi, K. Kusao, Y. Yoshioka, N. Nakamura, Jap.—US. Joint Seminar, Hawaii, 1975.



54. *M. Bernheim*, *Rad. Eff.* **18**, 231, 1973.
55. *J. Giber, K. Jozepovics*, 7<sup>th</sup> Int. Vacuum Congr., Wien. 1977.
56. *C. A. Evans*, *Anal. Chem.* **42**, 1130, 1970.
57. *T. Ishizuka*, *Anal. Chem.* **46**, 1487, 1974.
58. *M. Croset, D. Dieumagard*, *Corrosion Sci.* **16**, 703, 1976.
59. *J. R. Hintorne, C. A. Andersen*, *Am. Mineral.* **60**, 143, 1975.
60. *J. Schelten*, *Z. Naturforsch.* **23 a** 109, 1968.
61. *J. C. Pivin, C. Roques-Carmes*, *J. Microsc. Spectrosc. Electron.* **2**, 301, 1977.
62. *A. Lodding, J. M. Gourgout, L. G. Petersson, G. Frostell*, *Z. Naturforsch.* **29 a**, 897, 1974.
63. *M. Riedel, T. Nenadović, B. Perović*, II. Int. Conf. on SIMS, Münster, 1977.
64. *H. Rodriguez-Murcia, H. E. Beske*, 7<sup>th</sup> Int. Conf. on Mass Spectry. Florence, 1976.
65. *J. R. Hintorne*, 26<sup>th</sup> Pittsburgh Conf. 1975. Paper № 69.
66. *C. A. Andersen, J. R. Hintorne*, *Anal. Chem.* **45**, 1421, 1973.
67. *F. G. Rüdenauer, W. Steiger*, *Vacuum* **26**, 537, 1977.
68. *H. W. Werner, A. E. Morgan*, *Adv. in Mass Spectry.* **7**, 1977.
69. *J. Giber, L. Mezey*, *Phys. Lett. A.* (megjelenés alatt).
70. *R. Shimizu, T. Ishitani, Y. Ueshima*, *Jap. J. Appl. Phys.* **13**, 249, 1974.
71. *F. G. Rüdenauer, W. Steiger, R. Portenschlag*, *Microchim. Acta, Suppl.* **5**, 421, 1974.
72. *A. E. Morgan, H. W. Werner*, *J. Chem. Phys.* (megjelenés alatt).
73. *A. E. Morgan, H. W. Werner*, *Anal. Chem.* **48**, 699, 1976.
74. *D. S. Simons, J. E. Baker, C. A. Evans*, *Anal. Chem.* **48**, 1341, 1976.
75. *A. E. Morgan, H. W. Werner*, *J. Microsc. Spectrosc. Electron.* **2**, 285, 1977.
76. *J. F. Lovering*, in: [6] p. 135.





# SZUPRAVEZETŐ KVANTUM-INTERFEROMÉTEREK MŰKÖDÉSI ELVEI\*

VAD KÁLMÁN

MTA Atommag Kutató Intézet, Debrecen

## TARTALOM

1. BEVEZETÉS .....	599
2. A SZUPRAVEZETÉS MINT MAKROSZKOPIKUS KVANTUMJELENSÉG .....	600
2.1. A Meissner-effektus és a fluxus kvantáltsága .....	601
3. A JOSEPHSON-EFFEKTUSOK .....	603
3.1. Az egyenáramú Josephson-effektusok .....	606
3.2. A váltóáramú Josephson-effektusok .....	608
3.3. A Josephson-átmenetek egyenáramú feszültség-áram karakterisztikája .....	610
3.4. A Josephson-átmenetek gyakorlati megvalósítása .....	613
4. A KÉT-ÁTMENETES SZUPRAVEZETŐ KVANTUM-INTERFEROMÉTER (DC SQUID) .....	614
5. A RÁDIÓFREKVENCIÁS SZUPRAVEZETŐ KVANTUM-INTERFEROMÉTER (RF SQUID) .....	616
5.1. Egy Josephson-átmenetet tartalmazó zárt szupravezető gyűrű .....	616
5.2. Egy-átmenetes gyűrű kvantum-állapot változásainak kimutatása .....	618
5.3. Az RF SQUID gyakorlati megvalósítása .....	619
6. A SQUID ALKALMAZÁSAI .....	622
7. ÖSSZEFOGLALÁS .....	623
8. IRODALOM .....	624

## 1. Bevezetés

A szupravezető alagúteffektusnak, melyet a felfedezőjéről Josephson-effektusnak neveznek [1], ma már széles körű alkalmazási területe van. Elterjedten alkalmazzák feszültségetalonok, oszcillátorok, keverők, nagysebességű kapcsolók, memóriaelemek készítésére, illetve elektromágneses sugárzás detektálására. Gyakorlati felhasználásának legnagyobb területét azonban ma még a szupravezető kvantum-interferométerek jelentik.

A szupravezető kvantum-interferométerek a ma ismert legérzékenyebb mágneses fluxus mérő eszközök (az irodalomban az angol „Superconducting Quantum Interference Device” kifejezés rövidítéseként SQUID-nek nevezik). Működésük a zárt szupravezető gyűrűben fellépő mágneses fluxus kvantáltságán és a Josephson-effektuson alapszik. A műszer jelentőségét az egyedülállóan nagy érzékenységen kívül növeli a sokoldalúsága, hiszen a természet megismerésének igen széles területén (fizika, kémia, biológia, orvostudomány stb.) lehet hatásosan, eredményesen alkalmazni. Napjainkig az extrém kis feszültségek mérésétől kezdve az igen nagy pontosságot megkívánó elektromos és mágneses méréseken keresztül egészen az

\* Érkezett 1979. jan. 19.



agyhullámok detektálásáig sok mindenre felhasználták már: *minden olyan fizikai mennyiség, amely valamilyen módon visszavezethető mágneses tér mérésére, rendkívül érzékenyen mérhető segítségével.*

A kérdés fontosságára való tekintettel és figyelembe véve az ebben a témakörben megjelent nem túl nagy számú hazai irodalmat, érdemes részletesebben beszámolni a témáról [2], [9], [31], [32]. Cikkünk első részében ismerkedjünk meg a fluxuskvantálással és a Josephson-effektusokkal, míg a második részében a különböző típusú SQUID-ek működésével.

## 2. A szupravezetés mint makroszkopikus kvantumjelenség

A Schrödinger-egyenlet hullámfüggvényét leggyakrabban csak egy-két részecske leírására alkalmazzák. Ezen hullámfüggvénynek nincs makroszkopikus értelemben vett fizikai jelentése: abszolút értékének a négyzete nem a felfedezésekor gondolt töltéssűrűséget jelenti, hanem az elektron megtalálásának egységnyi térfogatra eső valószínűségi sűrűségét. A valószínűségi áramsűrűségnek szintén nincs makroszkopikus értelemben vett jelentése.

Más a helyzet azonban akkor, ha olyan fizikai jelenséget vizsgálunk, ahol nagyon sok részecske található ugyanazon kvantumállapotban, azaz, nagyon sok részecske rendelkezik ugyanazzal a hullámfüggvénnyel. Ekkor a hullámfüggvény abszolút értékének a négyzete már értelmezhető a részecskék sűrűségéeként. Ha még az is igaz, hogy mindegyik részecske azonos töltéssel rendelkezik, akkor a  $|\Psi|^2$  töltéssűrűségként is értelmezhető, és a valószínűségi áramsűrűség is a makroszkopikus értelemben vett elektromos áramsűrűséget szolgáltatja.

A szupravezetők esetében pontosan ez a helyzet. A Cooper-párok gyakorlatilag valamennyien azonos kvantumállapotban — az alapállapotukban — vannak. Továbbá, ha egy elektronpár állapotát leíró hullámfüggvény valamilyen jellemzője megváltozik (mondjuk a fázisa), akkor egyúttal a szupravezető tartomány mindegyik elektronpárjához tartozó hullámfüggvényben ugyanezen változás jön létre. Az elektronpár kvantummechanikai állapotának a megváltozása tehát makroméreteken is észlelhető lesz.

Cikkünkben a Josephson-átmenetek viselkedésének a leírását *Feynman* gondolatmenete alapján végezzük el [3], [4]. A gondolatmenet rendkívül egyszerű és világos. Segítségével könnyen megérthetjük a jelenségek fizikai hátterét. Mielőtt azonban rátérnénk a Josephson-átmenetek ismertetésére, ismételjük át néhány jól ismert kvantummechanikai összefüggést, majd a következő fejezetben, a dolgok megértése érdekében, két szupravezetéssel kapcsolatos jelenséggel — a Meissner-effektussal és a fluxus kvantáltsággal — ismerkedjünk meg. A kvantummechanikai összefüggések a következők:

1. A valószínűségi áramsűrűség az alábbi alakban határozható meg:

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*). \quad (1)$$

Ebben a kifejezésben az  $i$  a képzetes egységet jelenti,  $\hbar = h/2\pi$ ,  $h$  a Planck-féle állandó,  $m$  pedig a részecske tömegét jelenti.



2. Tetszőleges kvantummechanikai állapotban levő részecskét leíró egyenlet vektorpotenciál jelenlétében úgy módosul a vektorpotenciál nélküli esethez képest, hogy a  $\nabla$  operátort a  $\nabla \pm \frac{i \cdot q}{\hbar} \cdot \vec{A}$  operátorral helyettesítjük. ( $\vec{A}$  az elektromágneses tér vektorpotenciálját jelenti,  $q$  pedig a részecske töltését.) A „+” előjelet választjuk akkor, ha a  $\nabla$  operátor a  $\Psi^*$ -ra hat, és a „-” előjelet, ha a  $\Psi$ -re hat.

3. Szupravezetők esetében a Cooper-párok leírására egy  $\Psi$  hullámfüggvényt használunk, amelyre igaz az, hogy  $\int_V \Psi^* \Psi dV = N$  („ $V$ ” a szupravezető térfogata „ $N$ ” a Cooper-párok száma).  $\Psi$  ilyen alakban írható:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sqrt{\varrho(\vec{r}, t)} \cdot e^{i\varphi(\vec{r}, t)}, \quad (2)$$

ahol  $\varrho$  az elektronpárok sűrűsége,  $\varphi$  pedig a fázis.

4. Írjuk be az (1) egyenletbe a  $\Psi$  hullámfüggvény (2)-beli alakját, és hajtjuk végre a 2. pontban ismertetett helyettesítést. A következő egyenletet fogjuk kapni:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m} |\psi|^2 \cdot \nabla \varphi - \frac{2e}{m} |\psi|^2 \vec{A}.$$

A szupravezetőkben a Cooper-párok által létrehozott elektromos áramsűrűséget ebből nagyon egyszerűen megkapjuk, ha a  $\vec{j}_e = 2e \cdot \vec{j}$  és az  $m = 2 \cdot m_e$  helyettesítést hajtjuk végre, ahol „ $e$ ” és „ $m_e$ ” az elektron töltése, illetve tömege (itt  $\vec{j}_e$  már elektromos áramsűrűséget jelent):

$$\vec{j}_e = \frac{e\hbar}{m_e} |\psi|^2 \nabla \varphi - \frac{2e^2}{m_e} |\psi|^2 \vec{A}. \quad (3)$$

Látható, hogy a hullámfüggvény  $\varphi$  fázisának meghatározott fizikai jelentése van. A vektorpotenciál és az áramsűrűség ismeretéből közvetlenül kiszámítható a  $\nabla \varphi$  értéke, ami azt jelenti, hogy értékét a szupravezető egy pontjában önkényesen megválasztva a többi pontbeli értéke már egyértelműen meghatározható.

### 2.1. A Meissner-effektus és a fluxus kvantáltsága

Ha egy olyan fémtömböt, amely meghatározott hőmérsékleten (a kritikus hőmérsékletén) szupravezetővé válik, nem túl erős mágneses térbe helyezünk, majd lehűtjük a kritikus hőmérséklete alá, akkor a szupravezető anyag a belsejében levő mágneses teret kitaszítja magából. Ezt a jelenséget nevezzük a felfedezőjéről *Meissner-effektusnak*.

Magyarázata rendkívül egyszerű: amikor a fém szupravezetővé válik, megindul a felületén a saját árnyékoló árama, amelynek nagysága pontosan akkora, hogy a belsejében levő mágneses teret tökéletesen kompenzálja. A felírt egyenletek alapján könnyen meggyőződhetünk ennek helyességéről. Az egyszerűség kedvéért csak stationárius esettel foglalkozzunk. A Maxwell-egyenletekből következik, hogy stationárius esetben  $\nabla \vec{A} = 0$  és  $\nabla \vec{j} = 0$ . A (3) egyenlet divergenciáját véve és felhasználva ezt a két egyenletet is, a  $\Delta \varphi = 0$  egyenlethez jutunk. Ebből viszont az következik, hogy  $\varphi = \text{állandó}$  a fémtömb belsejében mindenütt, vagyis a (3) egyenlet jobb oldalának első tagja a  $\nabla \varphi$  miatt zérus:

$$\vec{j}_e = -\frac{2e^2}{m_e} |\psi|^2 \vec{A}.$$



Mivel  $2e|\Psi|^2 = \varrho$  a Cooper-párok sűrűségét jelenti

$$\vec{j}_e = -\frac{e \cdot \varrho}{m_e} \vec{A} = -\text{állandó} \cdot \vec{A}. \quad (4)$$

Ismert dolog, hogy stacionárius esetben a vektorpotenciál és az áramsűrűség a következőképpen van kapcsolatban egymással:

$$\Delta \vec{A} = -\frac{1}{\varepsilon_0 \cdot c^2} \cdot \vec{j}. \quad (5)$$

Itt  $\varepsilon_0$  a vákuum dielektromos állandója,  $c$  a fény sebessége.

A (4) és (5) egyenletet egybevetve:

$$\Delta \vec{A} = \lambda^2 \cdot \vec{A}, \quad \text{ahol} \quad \lambda = \sqrt{\varrho \frac{e}{\varepsilon_0 \cdot m_e \cdot c^2}}$$

a mágneses tér behatolási mélysége.

Például ezen vektoregyenlet  $x$  komponensének a megoldása:  $A_x = e^{\pm \lambda \cdot x}$ , ami azt jelenti, hogy a vektorpotenciál értéke a fém felületétől befelé haladva exponenciálisan csökken (fizikailag csak a negatív előjel értelmezhető).  $\lambda$  értékét meghatározva azt kapjuk, hogy kb.  $10^{-5}$  cm az a távolság, amely alatt a tér értéke „ $e$ ”-ad részére csökken.

Most tekintsük azt az esetet, amikor nem tömör anyagdarabot, hanem egy szupravezető gyűrűt hűtünk a kritikus hőmérséklete alá, ugyancsak külső mágneses tér jelenlétében. A gyűrű falvastagsága legyen sokkal nagyobb  $\lambda$  értékénél. A szupravezető anyag természetesen most is kidobja magából a  $\vec{B}$  vonalakat. Egy része a gyűrű belső területére, másik része a gyűrűn kívüli területre tolódik.

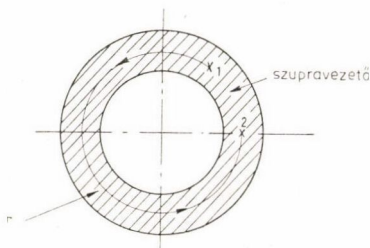
A következő lépésként távolítsuk el a külső mágneses tér forrását. Azt tapasztaljuk, hogy a gyűrű nyílásán átmenő  $\vec{B}$  vonalak nem szűnnek meg.

Magyarázat: A II. Maxwell-egyenlet értelmében az elektromos térerő gyűrű mentén vett vonalintegráljának egyenlőnek kell lenni a gyűrű felületén átmenő fluxus idő szerinti differenciálhányadosával. Mivel a gyűrű szupravezető állapotban van, az  $\vec{E}$  értéke zérus a szupravezető belsejében, tehát a fluxus a gyűrű nyílásában nem változhat meg (a mágneses fluxus „befagyott” a gyűrűbe).

Kimutatható, hogy a befagyott fluxus értéke nem lehet tetszőleges. Kvantált-nak kell lennie: csak egy bizonyos fluxus alapegység, a fluxuskvantum, egész számú többszöröse lehet. Nézzük meg, hogyan következik ez az egyenleteinkből.

A gyűrű anyagának a belsejében, a felület-től elég messze,  $\vec{j}_e = 0$ . Ebben az esetben a (3) egyenletünk leegyszerűsödik:

$$\nabla \varphi = \frac{2e}{\hbar} \cdot \vec{A}. \quad (6)$$



1. ábra. A szupravezető gyűrű és a gyűrű belsejében levő  $\Gamma$  görbe

Tekintsük az 1. ábrát, ahol a szupravezető gyűrűben feltüntetünk egy  $\Gamma$  görbét (a  $\Gamma$  sehol sem érinti a gyűrű felületét). Integráljuk a (6)



egyenletet ezen görbe mentén.

$$\int_{\Gamma} \nabla \varphi d\vec{r} = \frac{2e}{\hbar} \int_{\Gamma} \vec{A} d\vec{r}. \quad (7)$$

A  $\varphi$  függvény gradienseként az integrálja a  $\Gamma$  görbe mentén a görbe két végpontján felvett függvényértékek különbségével egyenlő:

$$\int_{\Gamma} \nabla \varphi d\vec{r} = \varphi(2) - \varphi(1).$$

Ha a  $\Gamma$  két végpontját közelítjük egymáshoz, egy zárt görbét kapunk. Ekkor, ha ezen zárt görbe egyszeresen összefüggő szupravezető tartományban lenne,  $\varphi(2) - \varphi(1) = 0$  teljesülne. A szupravezető gyűrű azonban nem egyszeresen összefüggő tartomány, tehát  $\varphi(2) - \varphi(1)$  nem biztos, hogy egyenlő lesz nullával. A  $\Psi = \sqrt{\varrho} \cdot e^{i\varphi}$  hullámfüggvényből kiszámítható fizikai mennyiségeknek viszont egyértelműeknek kell lenniük, azaz a hullámfüggvénynek minden pontban egyértékűnek kell lennie. Ez akkor igaz, ha a  $\varphi(2) - \varphi(1)$  különbség a  $2 \cdot \pi$  egész számú többszöröse.

$$\varphi(2) - \varphi(1) = 2\pi n, \quad \text{ahol } n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Ezt figyelembe véve a (7) egyenletünk így alakul:

$$2\pi n = \frac{2e}{\hbar} \oint_{\Gamma} \vec{A} d\vec{r}.$$

Elektrodinamikából tudjuk, hogy  $\vec{A}$ -nak a zárt  $\Gamma$  görbe mentén vett vonalintegrálja azonos a görbe által bezárt felületen átmenő  $\Phi$  fluxussal.

$$\oint_{\Gamma} \vec{A} d\vec{r} = \Phi.$$

Ezt is felhasználva, az előbbi egyenlet végső alakja (egy kis átrendezés után):

$$\Phi = n \cdot \frac{\pi \cdot \hbar}{e} = n \cdot \Phi_0,$$

ahol  $\Phi_0 = \frac{\pi \cdot \hbar}{e} = \frac{h}{2e} = 2,068 \cdot 10^{-15}$  Weber  $= 2,068 \cdot 10^{-7}$  Gauss  $\cdot$  cm<sup>2</sup>.  $\Phi_0$ -t nevezzük fluxuskvantumnak. A fluxus kvantáltságát kísérletileg *Deaver* és *Fairbank* amerikai, illetve *Doll* és *Näbauer* NSZK-beli kutatók mutatták ki 1961-ben [5], [6].

### 3. A Josephson-effektusok

Legyen két szupravezető tömb egymástól elválasztva valamilyen szigetelőréteggel. (A 2. ábrán ① és ②-vel vannak jelölve a szupravezető tartományok és „átmenet” felirattal a szigetelőréteg). A két szupravezető tartományhoz tartozó hullámfüggvényeket jelöljük  $\Psi_1$  és  $\Psi_2$ -vel. Ezen hullámfüggvények abszolút értékei a szigetelőrétegben a szupravezetőtől egyre távolodva exponenciálisan csökkennek. Ezért, ha a szigetelőréteg vastagsága elég nagy, a két hullámfüggvény között nincs átfedés, a fázisok teljesen függetlenek egymástól. Csökkentve a szigetelőréteg vastagságát



elérjük azt az esetet, amikor a hullámfüggvények között átfedés jön létre, és a fázisok között csatolás lép fel. A hullámfüggvények közötti átfedés pedig azt jelenti, hogy van bizonyos valószínűsége annak, hogy Cooper-párok jussanak át az egyik szupravezető tartományból a másikba — a szigetelőrétegen keresztül kvantummechanikai alagúteffektussal — felbomlás nélkül. (A valószínűség nagysága természetesen függ az átfedés mértékétől, azaz a szigetelőréteg vastagságától.)

Ezen jelenségnek számos következménye van. A legnyilvánvalóbb az, hogy létezik valamilyen szuperáram, amely keresztülfolyhat a két szupravezető közötti potenciálgáton. Általános esetben ezen szuperáram maximális értéke sokkal kisebb mint a két szupravezető tömbön keresztülfolyható szuperáramok maximális értékei, ezért ezt az áramot gyenge szuperáramnak is nevezzük, a két szupravezető közötti csatolást pedig *gyenge csatolásnak*. Gyenge csatolást tartalmazó rendszerben fellépő jelenségeket együttesen a felfedezőjéről *Josephson-effektusoknak* nevezzük, az átmenetet pedig Josephson-átmenetnek.

A szigetelőréteg például valamilyen oxidréteggel valósítható meg. De, amint majd a következő fejezetekben látni fogjuk, nem ez az egyedüli lehetőség Josephson-átmenetek létrehozására. Az általános feltétele, hogy két szupravezető közötti átmeneten a Josephson-effektusok létrejöjjenek, a következő: a szupravezetők közötti csatolás elég erős legyen ahhoz, hogy a hullámfüggvények fázisai ne legyenek függetlenek egymástól, de elég gyenge maradjon ahhoz, hogy a rendszer perturbálható legyen külső mágneses terekkel.

A továbbiakban nézzük meg közelebbről a Josephson-átmenetek viselkedését. A 2. ábrán legyen ismét az 1-es tartományban levő elektronpárok közös hullámfüggvénye  $\Psi_1$ , a 2-esben  $\Psi_2$ . Ha külső mágneses tér nincs jelen a két hullámfüggvényt az alábbi egyenletrendszer kapcsolja össze:

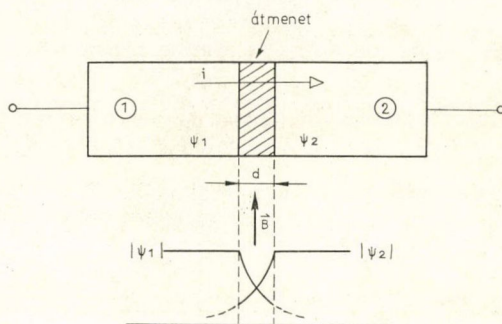
$$i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} = W_1 \cdot \Psi_1 + K \Psi_2 \quad (8a)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = W_2 \cdot \Psi_2 + K \Psi_1 \quad (8b)$$

„ $K$ ” az átmenetre jellemző csatolási állandó. Értéke függ a szigetelőréteg két oldalán levő szupravezetők tulajdonságaitól és a potenciálgát vastagságától. Ha „ $K$ ” zérus lenne — azaz a szigetelőréteg igen vastag lenne — az egyes tartományokhoz tartozó elektronpárok a legalacsonyabb  $W_1$  és  $W_2$  energiájú állapotot foglalnék el.

Kapcsoljunk az átmenetre a 2. ábrán bejelölt módon  $U$  feszültséget. Ekkor természetesen

$$W_1 - W_2 = 2eU. \quad (9)$$



2. ábra. A Josephson-átmenet



Legyen az energia nulla szintje  $W_1$  és  $W_2$  között éppen középen. A (8) egyenleteink így módosulnak

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} = -\frac{2eU}{2} \Psi_1 + K \cdot \Psi_2$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = +\frac{2eU}{2} \Psi_2 + K \cdot \Psi_1.$$

Végezzük el a 2. fejezet 3. pontjában mondottaknak megfelelően a  $\Psi_1 = \sqrt{\varrho_1} \cdot e^{i\varphi_1}$  és  $\Psi_2 = \sqrt{\varrho_2} \cdot e^{i\varphi_2}$  helyettesítéseket.

$$i\hbar \frac{\partial (\sqrt{\varrho_1} \cdot e^{i\varphi_1})}{\partial t} = -\frac{2eU}{2} \sqrt{\varrho_1} \cdot e^{i\varphi_1} + K \sqrt{\varrho_2} e^{i\varphi_2}$$

$$i\hbar \frac{\partial (\sqrt{\varrho_2} \cdot e^{i\varphi_2})}{\partial t} = \frac{2eU}{2} \sqrt{\varrho_2} \cdot e^{i\varphi_2} + K \sqrt{\varrho_1} e^{i\varphi_1}.$$

Legyen  $\varphi_2 - \varphi_1 = \delta$  és oldjuk meg ezt az egyenletrendszert úgy, hogy az egyenletek bal és jobb oldalán levő valós és képzetes részeket külön-külön egyenlővé tesszük egymással. Négy egyenletet fogunk kapni.

$$\frac{d\varrho_1}{dt} = \frac{2K}{\hbar} \sqrt{\varrho_1 \cdot \varrho_2} \cdot \sin \delta \quad (10)$$

$$\frac{d\varrho_2}{dt} = -\frac{2K}{\hbar} \sqrt{\varrho_1 \cdot \varrho_2} \cdot \sin \delta \quad (11)$$

$$\frac{d\varphi_1}{dt} = -\frac{K}{\hbar} \sqrt{\frac{\varrho_2}{\varrho_1}} \cdot \cos \delta - \frac{qU}{2\hbar} \quad (12)$$

$$\frac{d\varphi_2}{dt} = -\frac{K}{\hbar} \sqrt{\frac{\varrho_1}{\varrho_2}} \cdot \cos \delta + \frac{qU}{2\hbar}. \quad (13)$$

Az első két egyenlet arra ad felvilágosítást, hogy az egyes szupravezetőkben hogyan változnak meg a töltéssűrűségek a kezdeti pillanatban, milyen kezdeti áramok indulnak meg. A két áram természetesen ugyanolyan nagyságú, de ellentétes irányú. Ezen áramoknak lenne a feladata a két szupravezető között meglevő töltéssűrűség különbséget megszüntetni. Mivel az állandó potenciálkülönbség fenntartása érdekében az átmenetre egy telepet kapcsolunk, a kezdeti pillanatban kialakult áram nem egyenlítheti ki a töltéssűrűségeket, és így az áram továbbra is fennmarad. Másrészt, jó közelítéssel a  $\varrho_1 = \varrho_2 = \text{áll.}$  egyenlet is igaz. Emiatt a  $\frac{2K}{\hbar} \sqrt{\varrho_1 \cdot \varrho_2}$  kifejezés is állandó, amit  $i_c$ -vel is jelölhetünk. A (10) egyenletünket ennek megfelelően átrendezve megkapjuk a Josephson-átmeneten keresztülműködő áramsűrűséget:

$$i = i_c \cdot \sin \delta(t). \quad (14)$$

$i_c$  az átmenetre jellemző állandó: az átmenet kritikus áramsűrűsége, amely arányos a  $K$  csatolási állandóval. Ha az oxidréteg két oldalán azonos szupravezető van,  $i_c$  a következő módon függ a hőmérséklettől:

$$i_c = \frac{\pi}{2eR_n} \cdot \Delta(T) \cdot \tanh \frac{\Delta(T)}{2K_B \cdot T},$$

ahol  $T$  a hőmérsékletet jelenti,  $k_B$  a Boltzman-állandó,  $\Delta(T)$  a szupravezető hőmérsékletfüggő energiagap-je,  $R_n$  pedig az átmenet ellenállása normál állapotban [4].

$\delta$  időfüggése a (12) és (13) egyenletekből következik.

$$\frac{d\delta}{dt} = \frac{d\varphi_2}{dt} - \frac{d\varphi_1}{dt} = -\frac{2e \cdot U}{\hbar}. \quad (15)$$

Ezt az idő szerint integrálva kapjuk, hogy

$$\delta(t) = \delta_0 - \frac{2e}{\hbar} \int_0^t U(t) dt,$$

ahol  $\delta_0$  a  $\delta$  értéke a  $t=0$  időpillanatban.

(14) egyenletünk tehát így alakul:

$$i = i_c \cdot \sin \left( \delta_0 - \frac{2e}{\hbar} \int_0^t U(t) dt \right). \quad (16)$$

Levezetésünkben azt az esetet vizsgáltuk, amikor nincs külső mágneses tér jelen. Az irodalomban létezik egy másik szokásos alakja is ennek az egyenletnek, amely figyelembe veszi a külső mágneses teret. Ezt először Bruyn és Waele vezette le 1969-ben [7], [8]. Számolásukban a jelenlevő külső mágneses térnek a  $K$  csatolási állandóra kifejtett hatásából indultak ki. Az egyenlet ennek megfelelő alakja:

$$i = i_c \cdot \sin \left( \delta_0 - \frac{2e}{\hbar} \int_1^2 A_s ds \right).$$

Itt  $A_s$  az átmeneten jelenlevő mágneses tér vektorpotenciáljának a megfelelő komponensét jelenti és az integrálást az átmenetre kell elvégezni.

### 3.1. Az egyenáramú Josephson-effektusok

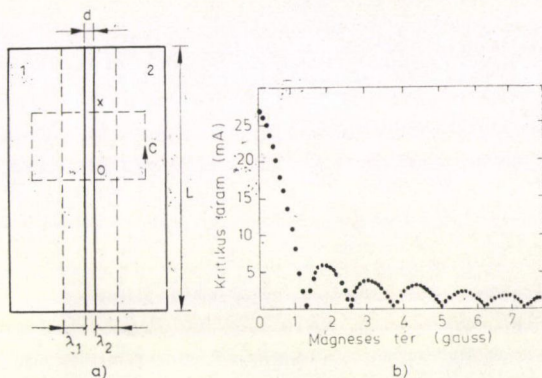
Az előző fejezetben levezetett (16) egyenletet a Josephson-átmenet alapegyenletének is nevezhetjük. Az átmenet viselkedését elektromágneses térben tökéletesen leírja. A (16) egyenletnek  $U(t)$  jellegétől függően három különböző esetét különböztetjük meg. Az *első*, amikor a Josephson-átmenetre kapcsolt feszültség zérussal egyenlő ( $U(t)=0$ ), a *második*, amikor időben állandó ( $U(t)=U_0$ ), és a *harmadik*, amikor erre az időben állandó feszültségre nagyfrekvenciás feszültséget is szuperponálunk ( $U(t)=U_0+a \cdot \cos(\omega t+\eta)$ ). Az első esetben lejátszódó jelenségeket nevezük egyenáramú vagy D. C. Josephson-effektusoknak, míg az utóbbi két esethez tartozó jelenségekört váltóáramú vagy A. C. Josephson-effektusoknak.



Ebben a fejezetben vizsgáljuk meg közelebbről az első, időtől független esetet. Ha  $U(t)=0$  a (16) egyenletünk lényegesen egyszerűsödik.

$$i = i_c \cdot \sin \delta_0. \quad (17)$$

A két szupravezetőt elválasztó szigetelőrétegen keresztül tehát, ha nincs az átmenetre feszültség kapcsolva, egy véges szuperáram folyik keresztül. Értéke adott  $i_c$  kritikus áramsűrűség esetén a  $\delta_0$  időtől független fázisértékkel van meghatározva, és az abszolút értéke természetesen a legnagyobb akkor, ha  $\delta_0 = \pm \frac{\pi}{2}$ .



3. ábra. a) Nem pontszerű Josephson-átmenet külső mágneses térben b) Az átmenet kritikus áramának függése a külső mágneses tér nagyságától [4], [33]

Általában a Josephson-átmenetek nem pontszerűek. A következő lépésként alkalmazzunk ilyen nem pontszerű átmenetre a síkjával párhuzamosan  $\vec{B}$  indukciójú mágneses teret (2. és 3. ábra). Amint a 3. ábrán feltüntettük, a mágneses tér a  $(\lambda_1 + \lambda_2 + d) \cdot L$  területen fog keresztülhatolni, ahol  $\lambda_1$  és  $\lambda_2$  a behatolási mélységek,  $d$  az oxidréteg vastagsága,  $L$  pedig az átmenet hossza. Tekintsük ismét a (6) egyenletünket:

$$\nabla \varphi = \frac{2e}{\hbar} \cdot \vec{A}.$$

Integráljuk ezt a 3. ábrán feltüntetett  $c$  görbe mentén.

$$\varphi(x) - \varphi(0) = \oint_c \frac{2e}{\hbar} \vec{A} d\vec{l} = \frac{2e}{\hbar} B(\lambda_1 + \lambda_2 + d) \cdot x = \frac{2\pi}{\Phi_0} \cdot B \cdot (\lambda_1 + \lambda_2 + d) \cdot x.$$

$\varphi(x)$  és  $\varphi(0)$  az 1 és 2 szupravezetők hullámfüggvényei közötti fáziskülöbség az „ $x$ ” és az „ $O$ ” pontban. „ $O$ ” az oxidréteg középpontját jelenti, „ $x$ ” pedig ettől az  $x$  távolságra levő pontot jelenti.

$\varphi(x)$  ismeretében a szuperáram, amely az  $x$  pontban átmegy az oxidrétegen,  $i = i' \cdot \sin \varphi(x)$ . Ebből a teljes felületen átmenő szuperáramot integrálással kapjuk meg.

$$i = i' \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} \sin \left[ \frac{2\pi}{\Phi_0} \cdot B \cdot (\lambda_1 + \lambda_2 + d) \cdot x + \varphi(0) \right] dx =$$

$$= i' \cdot \frac{2 \cdot \sin \left( \frac{2\pi}{\Phi_0} \cdot B \cdot (\lambda_1 + \lambda_2 + d)x + \varphi(0) \right)}{\frac{2\pi}{\Phi_0} \cdot B \cdot (\lambda_1 + \lambda_2 + d)x} = i' \cdot 2 \cdot L \cdot \frac{\sin \frac{\pi\Phi}{\Phi_0}}{\frac{\pi\Phi}{\Phi_0}} \cdot \sin \varphi(0).$$

Bevezetve az  $i_{c0} = i' \cdot 2 \cdot L$  jelölést és figyelembe véve a (17) egyenletet, további átalakításokat végezhetünk:

$$i = i_{c0} \cdot \frac{\sin \frac{\pi\Phi}{\Phi_0}}{\frac{\pi\Phi}{\Phi_0}} \cdot \sin \varphi(0) = i_c \cdot \sin \varphi(0).$$

Vagyis az átmenet  $i_c$  kritikus árama függ az átmeneten áthaladó  $\Phi$  mágneses fluxustól, és ez a függés az alábbi formában adható meg:

$$i_c = i_{c0} \frac{\left| \sin \frac{\pi \cdot \Phi}{\Phi_0} \right|}{\frac{\pi \cdot \Phi}{\Phi_0}}. \quad (18)$$

Amint látható, összefüggésünk analóg az optikai diffrakciót leíró Fraunhofer-egyenlettel és a már kísérletileg kimért függvénymenete a 3b) ábrán látható, amelyet Sn-oxid-Sn típusú átmenetre *D. N. Langeberg és munkatársai* határoztak meg 1966-ban [33].

### 3.2. A váltóáramú Josephson-effektusok

Kapcsoljunk időben állandó  $U_0$  feszültséget az átmenetre. Ekkor a (16) egyenlet így néz ki:

$$i = i_c \cdot \sin \left( \delta_0 - \frac{2e}{\hbar} \cdot U_0 \cdot t \right). \quad (19)$$

Érdekes eredményre jutottunk. A D. C. Josephson-effektus szerint, ha zérus feszültséget kapcsolunk az átmenetre, folyik valamilyen D. C. szuperáram. Ezen egyenletünk szerint pedig, ha zérustól különböző feszültségű feszültséggenerátort kapcsolunk az átmenetre, a szuperáram oszcillálni fog és nincs egyenáramú komponense.



Az oszcilláció frekvenciája:  $f_0 = \frac{2e}{h} U_0$ . Igen pontos mérések szerint a frekvencia és a feszültség közötti arányossági tényező [9]:

$$\frac{2e}{h} = 483,593718 \pm 0,000060 \frac{\text{MHz}}{\mu\text{V}}. \quad (20)$$

Látható, hogy már néhány mV előfeszítés esetén is ez a frekvencia a távoli infravörös tartományba esik. (Megjegyzés: az anyagban szupravezető állapotban is mindig jelen vannak normál állapotú vezetési elektronok. Az átmenetre kapcsolva az  $U_0$  egyenfeszültséget, ezek az elektronok természetesen létrehoznak valamilyen normál egyenáramot, de ezt most figyelmen kívül hagyjuk, a következő fejezetben foglalkozunk vele.)

Végül az előző fejezetben harmadik esetként említett jelenséget vizsgáljuk meg. Valamilyen  $U_0$  egyenfeszültséggel előfeszített Josephson-átmenetet helyezünk mikrohullámú térbe, azaz kapcsoljunk az átmenetre  $U(t) = U_0 + a \cdot \cos(\omega t + \eta)$  feszültséget. ( $a$ ,  $\omega$  és  $\eta$  rendre a nagyfrekvenciás feszültség amplitúdója, frekvenciája és fázisa.)

Az előjeltől eltekintve a (15) egyenletünk alábbi alakú lesz:

$$\hbar \frac{d\delta}{dt} = 2eU(t).$$

Írjuk be ebbe az egyenletbe  $U(t)$  fenti alakját és integráljuk az idő szerint, akkor a

$$\delta(t) = \frac{2eU_0}{\hbar} \cdot t + \frac{2ea}{\hbar\omega} \cdot \sin(\omega t + \eta) + \delta_0$$

egyenlethez jutunk. Beírva ezt az  $i = i_c \cdot \sin \delta(t)$  egyenletbe és Bessel-függvény szerint sorbafejtve:

$$i = i_c \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-1)^n \cdot J_n \left( \frac{2ea}{\hbar\omega} \right) \cdot \sin \left\{ \left( \frac{2eU_0}{\hbar} - n \cdot \omega \right) t - n \cdot \eta + \delta_0 \right\}. \quad (21)$$

Itt a  $J_n$  az  $n$ -edrendű elsőfajú Bessel-függvény. Látható, ha

$$2eU_0 = n \cdot \hbar \cdot \omega \quad (22)$$

a (21) egyenletben az időtől függő rész eltűnik, és a szuperáramnak van valamilyen egyenáramú komponense, amelynek nagysága:

$$i_n = i_c \cdot (-1)^n J_n \left( \frac{2ea}{\hbar\omega} \right) \cdot \sin(\delta_0 - n \cdot \eta). \quad (23)$$

A jelenség magyarázata rendkívül egyszerű. Ugyanis a két szupravezető között levő  $U_0$  potenciálkülönbség egy Cooper-pár részére  $2eU_0$  energiakülönbséget jelent. Közölve ezt az energiát a Cooper-párral, az az alacsonyabb energiájú állapotból a magasabb energiájú állapotba megy, vagyis az egyik szupravezetőből átmegy a másik szupravezető tömbbe (természetesen a köztük levő szigetelőréteg miatt csak alagút-effektussal).  $n=1$  esetben a (22) egyenlet szerint  $2eU_0 = \hbar \cdot \omega$ , azaz, ha a Cooper-pár



a mikrohullámú térből abszorbeál egy fotont, ennek az energiája már elegendő a potenciálkülönbség leküzdéséhez. Tetszőleges  $n$  esetén pedig  $2eU_0 = n\hbar\omega$ , tehát egyszerre  $n$  darab fotont abszorbeál. Fordított a helyzet, ha a Cooper-pár a magasabb potenciálú helyről az alacsonyabb potenciálú helyre megy. Ekkor ugyanis az energiakülönbségnek megfelelő energiájú fotont emittál. A gyenge elektromágneses sugárzás tehát az A. C. Josephson-effektusnál mindig jelen van.

A szuperáram adott feszültségeken megjelenő egyenáramú komponensének kísérleti kimutatásáról a következő fejezetben lesz szó, mivel megértéséhez ismerni kell a Josephson-átmenetek egyenáramú feszültség-áram karakterisztikáját.

### 3.3. A Josephson-átmenetek egyenáramú feszültség-áram karakterisztikája

Két szupravezető között — amint majd később látni fogjuk — legegyszerűbben pontkontaktussal valósítható meg a gyenge csatolás (6b ábra). Az átmenetre jellemző feszültség-áram karakterisztika elméleti és kísérleti elemzések során azonban már ez sem tekinthető egyszerű esetnek. A mindig jelenlevő kis kapacitás és induktivitás — amelyek egyébként nagyon sok más esetben elhanyagolhatóak — fontos szerepet játszanak a karakterisztika alakjában. Több modell is létezik, amelyek segítségével le lehet írni a jelenséget. Van amikor csak a kapacitást veszik figyelembe az átmenettel párhuzamosan kapcsolva [10], más esetben a kapacitással és az induktivitással is számolnak [11]. Jelen fejezetben azonban hanyagoljuk el mind a kettőt.

A 3.2. fejezetben említettem, hogy egy Josephson-átmenetre  $U_0$  egyenfeszültséget kapcsolva a normál állapotban levő elektronok létrehozhatnak valamilyen normál (ohmikus) egyenáramot. Ez az áram teljesen független a Cooper-párok által alkotott szuperáramtól (Josephson-áramtól), és ezért „háttér-áram”-nak is szokás nevezni. (A „háttér-áram” kifejezés azt jelenti, hogy ha a feszültség nem nulla, ez az áram mindig ott van a „háttérben”.) A Josephson-átmeneten keresztül folyó teljes áramerősséget a kettő összegeként írhatjuk fel.

$$i(t) = i_s + i_n$$

ahol  $i(t)$  az átmeneten átfolyó összáramot jelenti,  $i_s$  és  $i_n$  pedig ennek a szuper és a normál összetevőjét.

$i_s$  helyére a (14) egyenlettel meghatározott  $i_s = i_c \cdot \sin \delta(t)$ ,  $i_n$  helyére pedig Ohm törvényével meghatározott  $i_n = \frac{U_0}{R_n}$  alakot írhatjuk, a  $\delta(t)$  időtől függő alakját pedig a (15) egyenlet írja le. Általános esetben azonban az átmenetre kapcsolt feszültség sem állandó az időben, így a Josephson-átmenet viselkedését leíró két egyenlet legáltalánosabb formája a következő:

$$i(t) = i_c \cdot \sin \delta(t) + \frac{U(t)}{R_n}, \quad (24a)$$

$$\frac{d\delta(t)}{dt} = -\frac{2e}{\hbar} U(t). \quad (24b)$$

Ezek az egyenletek már a jelenlevő ohmikus áramot is figyelembe veszik.

Egy Josephson-átmenet feszültség-áram karakterisztikájának a kísérleti meghatározásakor az átmenetet elektromosan kell táplálnunk. Az átmenet elektromos



táplálásának két lehetséges alapesete van: feszültséggenerátoros táplálás és áramgenerátoros táplálás. Amint majd látni fogjuk a karakterisztika alakja még ilyen külső tényezőtől is, mint az elektromos táplálás módja, jelentősen függ.

Foglalkozunk először a feszültséggenerátoros esettel. Mivel a feszültség időben állandó, egyenleteinkből az átmeneten keresztülfolyó áram időátlagára szeretnénk következtetni. A (24) egyenletek szerint:

$$i(t) = i_c \cdot \sin \left( \delta_0 - \frac{2e}{\hbar} \cdot U \cdot t \right) + \frac{U}{R_n}.$$

Ha  $U=0$  ismét eljutunk a (17) egyenlethez, amikor  $+i_c$  és  $-i_c$  közötti tetszőleges nagyságú időben állandó szuperáram folyhat keresztül az átmeneten. Ha  $U \neq 0$  a szuperáram-komponens időátlaga zérus, csak az Ohm-törvénynek megfelelő intenzitású normál áram folyik keresztül az átmeneten.

Összefoglalva:

$$\text{ha } U = 0, \text{ akkor } 0 \leq \overline{i(t)} \leq i_c$$

$$\text{ha } U \neq 0, \text{ akkor } \overline{i(t)} = \frac{U}{R_n}.$$

Ábrázolva ezt a függvényt a 4a ábrán látható görbét kapjuk. A görbe kezdeti szakaszát szándékosan nem rajzoltuk be. Ez arra utal, hogy a normál állapotban levő elektronok is csak alagúteffektussal juthatnak át a potenciálgáton, ami miatt a görbe kezdeti alakja ezen a szakaszon eltér az egyenestől. A görbe pontos alakja függ magától az átmenettől, illetve a hozzá kapcsolódó külső áramköröktől.

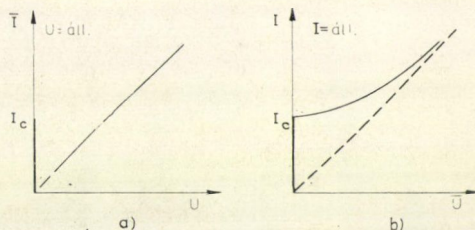
Most nézzük meg mi a helyzet, amikor áramgenerátorosan tápláljuk az átmenetet. Ebben az esetben az áram időtől független, és így az átmeneten fellépő feszültség időátlagára vagyunk kíváncsiak. A (24a) egyenlet szerint az átmeneten átfolyó összárám így határozható meg:

$$i = i_c \cdot \sin \delta(t) + \frac{U(t)}{R_n}.$$

Az egyenletünkéből látszik, ha  $i > i_c$  az  $U(t)$  feszültség periodikus függvénye lesz a  $\delta(t)$ -nek. Ebből meghatározva az  $U(t)$  feszültség időátlagát ismét két egyenletet kapunk, amelyeket ábrázolva a 4b ábrán látható görbét kapjuk:

$$\text{ha } i > i_c, \text{ akkor } \overline{U(t)} = R_n \cdot (i^2 - i_c^2)^{\frac{1}{2}}$$

$$\text{ha } 0 \leq i \leq i_c, \text{ akkor } \overline{U(t)} = 0.$$



4. ábra. A Josephson-átmenetek feszültség-áram karakterisztikái a) feszültséggenerátoros táplálás esetén b) áramgenerátoros táplálás esetén

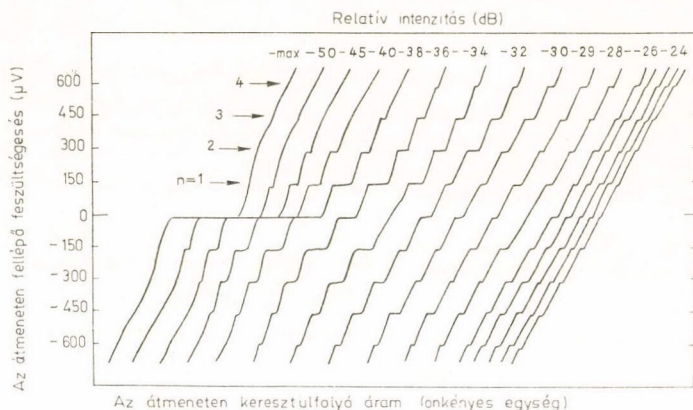


Az áramgenerátoros táplálás könnyen megvalósítható oly módon, hogy az átmenetet egy nagy belső impedanciájú áramforrásról tápláljuk. Mivel a Josephson-átmenetek általában kis impedanciájúak, a gyakorlatban az áramgenerátoros táplálást könnyebb megvalósítani a feszültséggenerátoros táplálással szemben.

Most térjünk vissza az A. C. Josephson-effektushoz. A szuperáramnak az adott feszültségeken megjelenő egyenáramú komponenseit szeretnénk kimutatni kísérletileg. Ha egy Josephson-átmeneten  $i > i_c$  egyenáramot vezetünk át, az átmenet ohmi-

kussá válik, és a rajta eső feszültség átlagos értékét az előbb felírt  $\overline{U(t)} = R_n \cdot (i^2 - i_c^2)^{\frac{1}{2}}$  egyenlettel határozhatjuk meg. Az egyenletből látszik, ha a kritikus áram értéke valamilyen  $\Delta i_c$ -vel ugrásszerűen megváltozik, akkor az  $\overline{U(t)}$  értéke is ugyanúgy megváltozik.

Tegyük mikrohullámú térbe egy Josephson-átmenetet és vegyük fel az egyenáramú feszültség-áram karakterisztikáját áramgenerátoros táplálás mellett. Azokban az esetekben, amikor az átmeneten eső feszültség értéke és a mikrohullámú tér frekvenciája eleget tesz a (22) egyenlet által leírt feltételnek, a kritikus áram értéke ugrásszerűen megváltozik. Ez a változás, az előbb mondottak értelmében, a mért  $\overline{U(t)}$  értékeiben is mutatkozik, azaz konstans feszültségű lépcsők jelennek meg az I—V karakterisztikában. Ilyen konstans feszültségű lépcsők láthatók az 5. ábrán.



5. ábra. Nb—Nb pontkontaktusos Josephson-átmenet feszültség-áram karakterisztikája a mikrohullámú tér intenzitásának a függvényében, 72 GHz-es frekvencián, 4,2 °K hőmérsékleten.  $n=1, 2, \dots$  jelenti, hogy egy Cooper-pár egyszerre hány darab foton abszorbeál a mikrohullámú térből [4], [34]

A külső tér frekvenciája és az áramugrásokhoz tartozó feszültségértékek egyébként pontosan mérhetők. A (20) egyenletben szereplő  $2e/h$  értéket ezzel a módszerrel lehetett a feltüntetett nagy pontossággal meghatározni.

Az 5. ábrán megfigyelhető az egyes feszültségekhez tartozó lépcsők szélességének periodicitása a mikrohullámú tér intenzitásának a függvényében (a (23) egyenlet alapján Bessel-függvények szerint változik a lépcsők szélessége, mivel a  $\Delta i_c = i_n$ ).

A jelenséget először Shapiro 1963-ban figyelte meg kísérletileg [12].



### 3.4. A Josephson-átmenetek gyakorlati megvalósítása

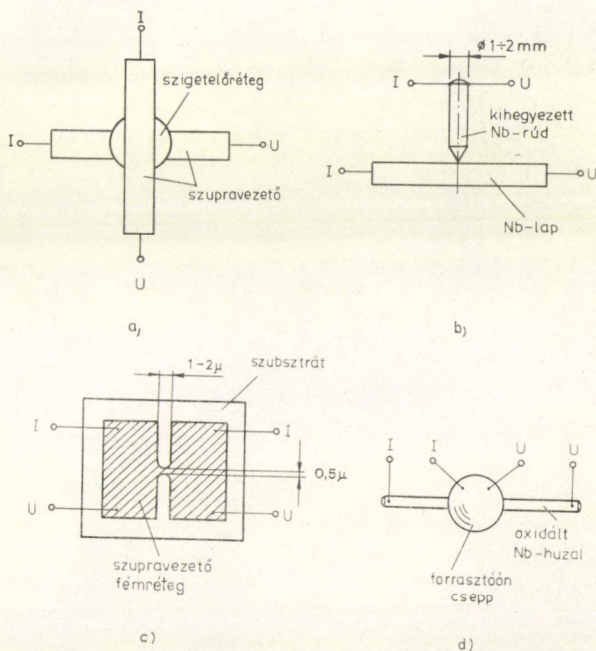
A Josephson-átmenetek gyakorlati megvalósításának többféle módja is létezik:

1. Josephson-átmenetként viselkedik az olyan elrendezés, amelyben néhány  $nm$  vastagságú oxid vagy más szigetelő réteget, esetleg nem szupravezető (normál) fém-réteget helyezünk el két vákuumban párologtatott vékony szupravezető rétegek között (6a ábra).

2. A Josephson-átmenetek készítésének egyik leggyakoribb módja, ha két szupravezető tömb között létrehozott pontkontaktust használjuk fel gyenge csatolásra. Pontkontaktus előállítása: 1–2 mm átmérőjű nióbium csavarnak néhány mikron átmérőjű hegyet készítünk, és ezt a hegyes csavart egy sík felületű nióbium tömbhöz nyomjuk a kívánt kritikus áram értékétől függő mértékben. (A nióbium  $9,15^\circ K$  alatt válik szupravezetővé.) (6b ábra).

3. Két szupravezető között mikrohíd segítségével is létesíthetünk összeköttetést. Ez szintén Josephson-átmenetként viselkedik. A mikrohíd olyan szupravezető összeköttetés, amelynek méretei a 2.1. fejezetben ismertetett  $\lambda$  behatolási mélységnél kisebbek (6c ábra).

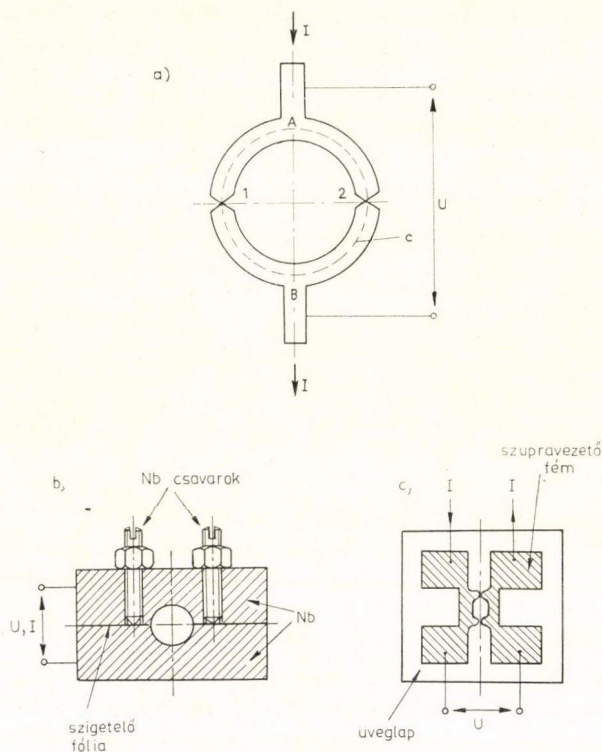
4. A 6d ábrán feltüntettünk még egy lehetőséget Josephson-átmenet készítésére. Ez a Clarke-féle forraszcsepp-átmenet [13]. Mivel a folyékony hélium hőmérsékletén a forrasztóónc-csepp is szupravezetővé válik, ezért a nióbium felületén kialakult oxidréteg a nióbium és a forrasztóónc-csepp által alkotott szupravezető tartományok között hoz létre gyenge csatolást. A tiszta nióbium felületén már szobahőmérsékleten is rövid idő alatt képződik olyan vastag oxidréteg, amely a Josephson-átmenet kialakulásához megfelelő.



6. ábra. A Josephson-átmenet gyakorlati megvalósításai

#### 4. A két-átmenetes szupravezető kvantum-interferométer (DC SQUID)

A 3.1. fejezetben láttuk, hogy egy Josephson-átmenet kritikus árama periodikus függvénye a külső mágneses térnek ((18) egyenlet). Most vizsgáljuk meg azt az esetet, amikor két teljesen azonos Josephson-átmenet van egy szupravezető gyűrűben elhelyezve. Tegyük fel, hogy az átmenetek méretei olyan kicsik, hogy a (18) egyenlettel leírt diffrakció csak viszonylag nagy ( $mT$  nagyságú) mágneses tereknél észlelhető. Az elrendezés elvi rajzát és két gyakorlati megvalósítását a 7. ábrán mutatjuk be. A 7a ábrán bejelölt hozzávezetésekén mérve a rendszer kritikus áramát, most is azt tapasztaljuk, hogy értéke rendkívül érzékenyen függ a külső mágneses tértől, és ez a függés most is periodikus.



7. ábra. A DC SQUID a) elvi elrendezése  
b), c) gyakorlati megvalósítása

Bejelöltünk a 7a ábrán egy  $C$  görbét is, amely a szupravezetők felületét sehol nem érintve körbe megy a gyűrűn. Mivel  $\vec{j}_e$  áramsűrűségvektor zérus a szupravezető tömbök belsejében, a (3) egyenletünk így módosul:

$$\nabla\varphi = \frac{2e}{\hbar} \vec{A}. \quad (25)$$



Ebből a fáziskülönbség az 1 és 2 pontok között, mind az  $A$  mind a  $B$  tartomány esetében:

$$\varphi_{1A} - \varphi_{2A} = \frac{2e}{\hbar} \int_{1A}^2 \vec{A} d\vec{l}, \quad (26)$$

$$\varphi_{2B} - \varphi_{1B} = \frac{2e}{\hbar} \int_{2B}^1 \vec{A} d\vec{l}. \quad (27)$$

Az integrálásokat 1-től 2-ig az  $A$  tartományban kell elvégezni, és 2-től 1-ig a  $B$  tartományban.

Az elrendezésen keresztülfolyó DC szuperáramot az alábbi módon írhatjuk fel:

$$I = i_c \cdot \{\sin(\varphi_{1A} - \varphi_{1B}) + \sin(\varphi_{2A} - \varphi_{2B})\}. \quad (28)$$

(Az egyes átmeneteken keresztülfolyó szuperáramok összegződnek.) A (26) és (27) egyenletekből következik, hogy

$$(\varphi_{1A} - \varphi_{2A}) + (\varphi_{2B} - \varphi_{1B}) = \frac{2e}{\hbar} \oint_C \vec{A} d\vec{l} = 2\pi \frac{\Phi_{\text{ext}}}{\Phi_0},$$

ahol  $\Phi_{\text{ext}}$  a  $C$  görbe által bezárt területen átmenő külső fluxust jelenti. Általános esetben a  $C$  görbe által bezárt területen átmenő teljes fluxus tartalmazza a gyűrűben keringő szuperáram által létrehozott fluxust is. Az egyszerűség kedvéért azonban tegyük fel, hogy az átmenetek kritikus árama kicsi, így ez a rész elhanyagolható.

Alkalmazva a megfelelő trigonometrikus azonosságot a (28) egyenletünkre és figyelembe véve az utolsó egyenletünk által leírt eredményt is, a DC szuperáramra ezt kapjuk:

$$I = 2i_c \cdot \cos \frac{\pi \Phi_{\text{ext}}}{\Phi_0} \cdot \sin \left\{ \frac{1}{2} (\varphi_{1A} + \varphi_{2A} - \varphi_{1B} - \varphi_{2B}) \right\} =$$

Újabb jelöléseket vezetve be:

$$= I_{\text{max}} \cdot \sin \varphi'.$$

Ezzel megkaptuk a rendszer kritikus áramának a gyűrű belsejében levő mágneses fluxustól való függésének a matematikai alakját:

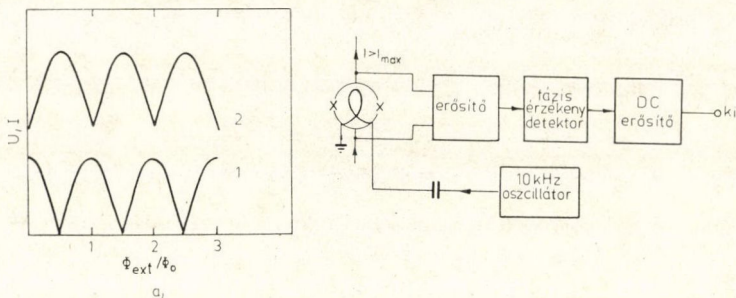
$$I_{\text{max}} = 2 \cdot i_c \cdot \left| \cos \frac{\pi \cdot \Phi_{\text{ext}}}{\Phi_0} \right|.$$

Amint látjuk a rendszeren átmenő maximális szuperáram ( $I_{\text{max}}$ ) a  $\Phi_{\text{ext}}$  függvényében periodikusan változik, mivel az egyes átmeneteken keresztülfolyó szuperáramok fázisai interferálnak. Emiatt ezt az elrendezést kvantum-interferométernek, vagy röviden — az angol „superconducting quantum interference device” kifejezés rövidítéseként — SQUID-nek nevezzük.

Ha  $I > I_{\text{max}}$ , akkor az interferométer két sarkán mérhető feszültség is periodikus változást mutat  $\Phi_{\text{ext}}$  függvényében (a 3.3. fejezetben mondottak miatt), amit a 8a ábrán láthatunk. A gyakorlatban az  $U$  feszültség változását váltoáramú módszerrel szokás mérni. Előfeszítve a rendszert egy  $I > I_{\text{max}}$  egyenárammal és a külső mág-



neses teret ismert frekvenciával modulálva, az interferométeren megjelenő változó feszültséget már könnyen lehet erősíteni. A további jelfeldolgozási technika pedig azonos a következő fejezetekben ismertetendő rádiófrekvenciás SQUID rendszerével (8b ábra.)



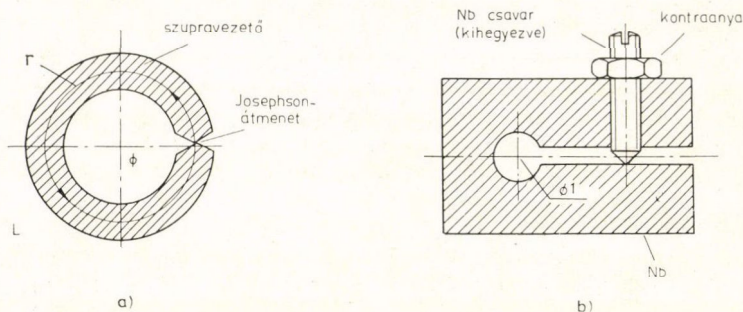
8. ábra. a) A DC SQUID karakterisztikái  
1. A kritikus áram függése a külső fluxustól  
2.  $I > I_{\max}$  esetén a feszültség függése a külső fluxustól  
b) A DC SQUID elektronikus rendszere

## 5. A rádiófrekvenciás szupravezető kvantum-interferométer (RF SQUID)

### 5.1. Egy Josephson-átmenetet tartalmazó zárt szupravezető gyűrű

Amint az előző fejezetben meggyőződünk róla, a két-átmenetes szupravezető gyűrű segítségével igen érzékeny magnetométert lehet készíteni. Ma már nagyon sok ilyen DC SQUID van a világ különböző laboratóriumaiban. A gyakorlati elkészítésük azonban komoly problémát jelent a közel azonos kritikus áramú átmenetek létrehozása. Éppen ezért elterjedtebben alkalmaznak egy másféle elrendezést, amelyben a szupravezető gyűrű csak egy Josephson-átmenetet tartalmaz.

Vizsgáljunk meg közelebbről ilyen, egy átmenetet tartalmazó szupravezető gyűrűt. Az elrendezés elvi rajzát és a gyakorlati megvalósítás egy példáját (egy pont-kontaktusos elrendezést) a 9. ábrán láthatunk. Tegyük fel most is, hogy az átmenet



9. ábra. Egy Josephson-átmenetet tartalmazó zárt szupravezető gyűrű  
a) elvi rajza b) gyakorlati megvalósítása



méretei kicsik (a (18) egyenlettel leírt diffrakció elkerülése céljából). A kérdés a következő: hogyan függ a kívülről alkalmazott  $\Phi_{\text{ext}}$  mágneses fluxustól a gyűrű belsejében mérhető  $\Phi$  fluxus.

Legyen a gyűrű induktivitása  $L$ , a Josephson-átmenet kritikus árama  $i_c$ . Legyen továbbá mind a külső mágneses fluxus, mind a gyűrű belsejében mérhető fluxus értéke nulla a kezdeti pillanatban ( $\Phi_{\text{ext}}=0$  és  $\Phi=0$  a  $t=0$  időpillanatban). Mivel kezdetben a gyűrű még teljesen szupravezető, ha növelni kezdjük a külső mágneses tér értékét, akkor egy  $i_s$  árnyékoló köráram indul meg úgy, hogy  $\Phi$  állandó maradjon (azaz nulla):

$$\Phi = \Phi_{\text{ext}} - L \cdot i_s.$$

A gyűrűben keringő áram a Josephson-átmeneten is keresztülfolyik, és ezért, ha a  $\Phi = \text{áll.} = 0$  fenntartásához szükséges köráram értéke meghaladja az  $i_c$  kritikus áramértéket (ekkor az átmenet ohmikusá válik), a gyűrű nem képes tovább fenntartani az eredeti állapotot, és befogad egy vagy több fluxuskvantumot. Utolsó egyenletünkben az  $i_s$  köráram helyére beírva a (14) egyenlettel meghatározott alakját, a

$$\Phi = \Phi_{\text{ext}} - L \cdot i_c \cdot \sin \delta \quad (29)$$

egyenletet kapjuk.

A (25) egyenletünk felírásakor említett megfontolás a  $\mathbf{j}_e$  áramsűrűségvektorra most is érvényes, tehát ismét integrálva a (25) egyenletünket a 9a ábrán feltüntetett  $\Gamma$  görbe mentén:

$$\varphi(2) - \varphi(1) = \delta = \frac{2e}{\hbar} \oint_{\Gamma} \vec{A} d\vec{l}.$$

A jobb oldalon elvégezve az integrálást a  $\delta$  alakja így módosul:

$$\delta = \frac{2e}{\hbar} \Phi = 2\pi \cdot \frac{\Phi}{\Phi_0}.$$

Beírva ezt a (29) egyenletünkbe:

$$\Phi_{\text{ext}} = \Phi + L \cdot i_c \cdot \sin \left( 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \right). \quad (30)$$

Ez az egyenlet jellemzi az egy átmenetet tartalmazó szupravezető gyűrűt. Látható, hogy a  $\Phi$  oszcillál a  $\Phi = \Phi_{\text{ext}}$  egyenes mentén  $\Phi_0$  periódussal. Differenciáljuk a  $\Phi$ -t a  $\Phi_{\text{ext}}$  szerint:

$$\frac{d\Phi}{d\Phi_{\text{ext}}} = \frac{1}{1 + (2\pi \cdot L \cdot i_c / \Phi_0) \cdot \cos(2\pi \Phi / \Phi_0)}.$$

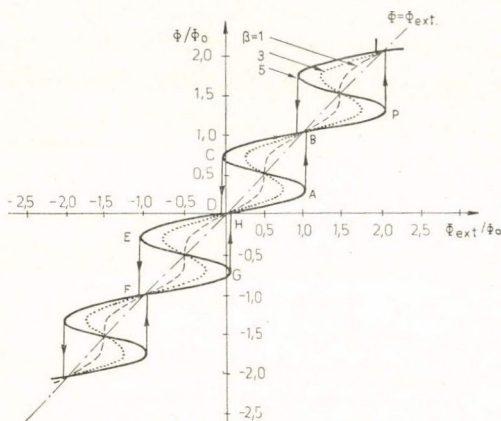
A differenciálhányados értéke pozitív, amennyiben  $2\pi L \cdot i_c / \Phi_0 < 1$ . Ekkor  $\Phi$  egyértékű függvénye  $\Phi_{\text{ext}}$ -nek. De, ha  $2\pi L \cdot i_c / \Phi_0 > 1$ , a  $d\Phi/d\Phi_{\text{ext}}$  értéke már pozitív, negatív, illetve végtelen is lehet, és  $\Phi$  többértékű függvénye lesz a  $\Phi_{\text{ext}}$ -nek.

Ezek ismeretében könnyen ábrázolni tudjuk a (30) egyenlet által leírt függvényt. A  $2\pi L \cdot i_c / \Phi_0$  mennyiséget  $\beta$ -val jelölve, különböző  $\beta$  értékek mellett ábrázoltuk a  $\Phi - \Phi_{\text{ext}}$  függvényt a 10. ábrán.

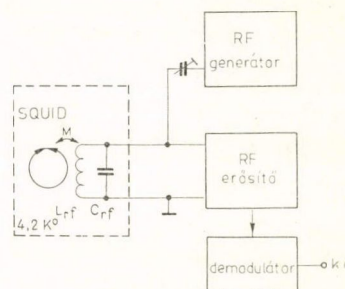


### 5.2. Egy-átmenetes gyűrű kvantum-állapot változásainak kimutatása

Egy Josephson-átmenetet tartalmazó szupravezető gyűrű kvantum-állapot változásainak kimutatása céljából a gyűrűt csatoljuk induktív módon egy párhuzamos rezgőkörhöz (11. ábra), melyet rádiófrekvenciás jellel áramgenerátorosan gerjesztünk a rezonanciafrekvenciáján, és mérjük a rezgőkörön megjelenő RF jel amplitúdóját erősítés és demodulálás után (azaz a rezgőkör impedanciáját).



10. ábra. Egy Josephson-átmenetet tartalmazó szupravezető gyűrű fluxusállapot diagramja. A lényeges paraméter a  $\beta = 2\pi L \cdot i_c / \Phi_0$ . Amennyiben ez nem nagyobb mint egy, akkor a függvény egyértékű, ha nagyobb mint egy, akkor többértékű [14]

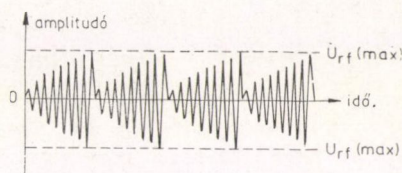


11. ábra. Az egy-átmenetes szupravezető gyűrűhöz kapcsolódó elektronikus áramkör

Legyen a SQUID állapota a 10. ábrán az origóban (tehát mind a  $\Phi$ , mind a  $\Phi_{\text{ext}}$  értéke legyen nulla). Kapcsoljuk be az RF generátort és gerjesztjük a szupravezető gyűrűt egyre nagyobb amplitúdójú RF jellel. Mivel a gyűrű szupravezető állapotban van, és így az általa körbezárt területen átmenő fluxus értéke nem változhat meg, az árnyékoló  $i_s$  köráram ugyanilyen frekvenciájú és a gerjesztő RF jel amplitúdójával arányos amplitúdójú rezgéseket végez. Speciális esetben, ha  $\beta=5$ , a gyűrű állapota a vastagon kihúzott állapotgörbén az A és az E pont között fog rezegni. Növekvő RF jel amplitúdóját, egyre jobban megközelítjük mind az A, mind az E pontot. Előbb elérve például az A pontot, ahol az  $i_s$  értéke éppen egyenlő az átmenet  $i_c$  kritikus áramával, a SQUID állapota az A-ból átmegy a B-be, a gyűrű befogad egy fluxuskvantumot, ami energiadisszipációt jelent. Ezen energiadisszipáció miatt a kör jósági tényezője leromlik, a rezgés amplitúdója erőteljesen lecsökken. A gyűrű új állapota a C–B görbén lesz a H pont fölött. A rezgés amplitúdója a következő periódusban már ismét növekedni kezd. Ekkor azonban a C-pontból a D-pontba ugrik a gyűrű kvantumállapota, ami újabb energiadisszipációt, azaz rezgési amplitúdócsökkenést jelent. A gyűrű állapota tehát befutotta az ABCD görbét és ezen idő alatt disszipált energia arányos az ABCD „négyyszög” alatti területtel. A rezgés amplitúdója az idő függvényében a 12. ábrán feltüntetett módon alakul. Amint látható, a SQUID modulálja a nagyfrekvenciás jel amplitúdóját (parametrikus erősítő).



A gerjesztés amplitúdóját tovább növelve a demodulált RF jel amplitúdója nem növekszik. A gerjesztő jel amplitúdónövekedésének hatására ugyanis megnő az időegység alatti fluxusugrások száma (mert a gyűrű állapota rövidebb idő alatt éri el az *A*, majd pedig a *C* pontot), ami nagyobb energiadisszipációt jelent. A gyakoribb fluxusugrások pedig azt jelentik, hogy a 12. ábrán a moduláló frekvencia értéke fog nőni. Ha még mindig növeljük a gerjesztés amplitúdóját egy idő múlva bekapcsolódik a rezgésbe az *EFGH* görbe is, de még ekkor sincs amplitúdónövekedés a demodulált RF jelben. További növekedést csak akkor tapasztalunk, ha az RF gerjesztő áram minden periódusban annyi energiát táplál a rezgőkörbe, ami képes fedezni a SQUID számára az *OABCDEFGH* hiszterézishúrok befutása közben eldiszzipált energiát. Következésképpen a 13. ábrán látható, úgynevezett lépcső-karakterisztikát fogjuk kapni.

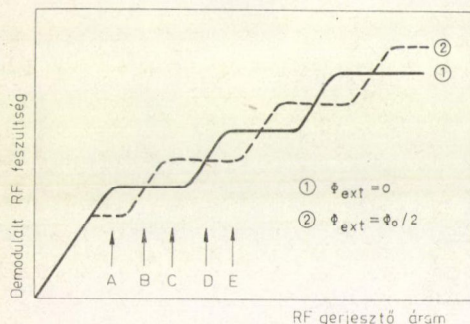


12. ábra. A gerjesztő rezgőkörben kialakult rezgés amplitúdója az idő függvényében

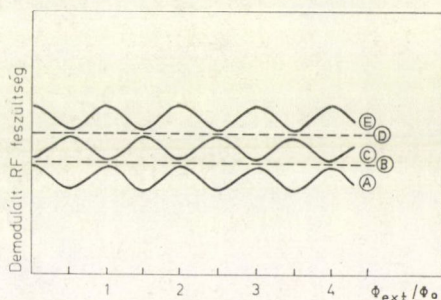
Ha a külső fluxus nem nulla, hanem például  $\Phi_0/2$  az első fluxusugrás kisebb RF jel amplitúdónál következik be, vagyis az első lépcső eltolódik, alacsonyabban jelentkezik.

Rögzítve az RF gerjesztés szintjét, például a 13. ábra szerinti *A* pontban, és változtatva a külső „időben állandó” mágneses teret (a mérendő fluxust), az ún. háromszög-karakterisztikát kapjuk (14. ábra).

A gyűrű működtetésének ezt a módját egyébként disszipatív üzemmódnak is nevezzük.



13. ábra.  
Az RF SQUID lépcső-karakterisztikái



14. ábra. Az RF SQUID háromszög-karakterisztikái (az A, B, ... betűk az RF gerjesztés szintjét jelölik a 13. ábrának megfelelően)

### 5.3. Az RF SQUID gyakorlati megvalósítása

Ezen fejezetben belül ejtsünk néhány szót az RF SQUID érzékelő részének gyakorlati megvalósításáról, illetve a működtetéséhez szükséges elektromos áramkörökről.

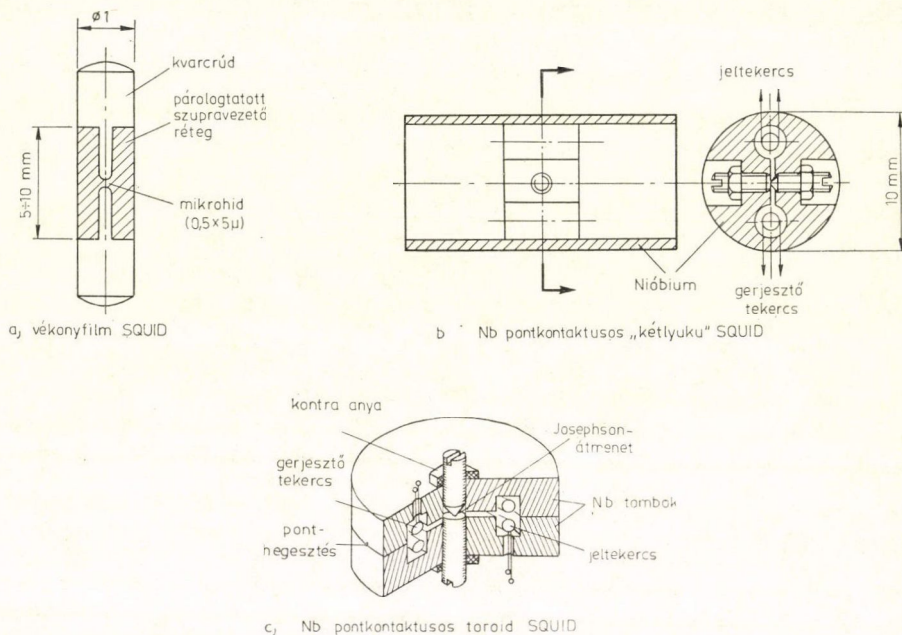
Amint már az előző fejezetben is szó volt róla, RF SQUID esetében egy Josephson-átmenetet kell egy szupravezető gyűrűbe beépíteni. Fém — fémoxid — fém



alagútátmenet a nagy kapacitás miatt kevésbé alkalmas RF SQUID készítésére. Így két lehetőség marad a Josephson-átmenet létrehozására:

- a) pontkontaktus létrehozása,
- b) mikrohíd készítése.

Mindkét típusnak megvan a maga előnye és hátránya. A pontkontaktusos SQUID-ek elkészítése könnyebb, érzékenyséjük jobb, induktivitásuk kisebb a mikrohidas változatnál. Hátrányuk, hogy a pontkontaktus megfelelő beállítása külön problémát jelent. A gyakorlatban a legelterjedtebb két pontkontaktusos típust láthatjuk a 15b és 15c ábrán. Általában nióbiumot használnak a készítésükhöz. Ez amiatt van, mert a nióbium a legnagyobb kritikus hőmérséklettel és térrel ( $T_c = 9,15^\circ\text{K}$ ,  $H_c = 0,2T$ ) rendelkező elsőfajú szupravezető. A pontkontaktus létrehozása úgy történik, hogy az egyik csavart mikroszkopikus hegyességűre készítik (kb.  $1\ \mu\text{m}$  sugarú legyen), majd a SQUID testbe helyezve a lapos és hegyes csavarpárt addig csavarják egymás felé, amíg a kívánt kritikus áram létre nem jön. Szokásos a két csavar érintkező felületeinek eloxálása is, amellyel az átmenet stabilitását lehet növelni [15].



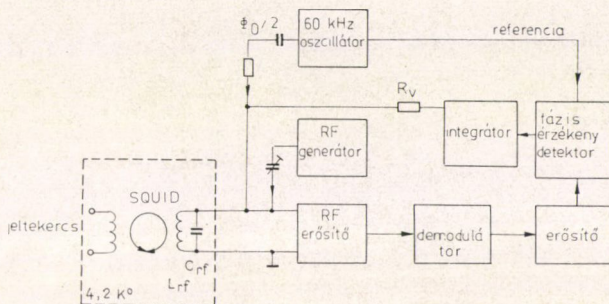
15. ábra. Az RF SQUID érzekelőjének gyakorlati megvalósításai

Újabban egyre terjednek a vékonyfilm SQUID-ek, ahol a zárt szupravezető gyűrű egy kvarccsőre párolgatott szupravezető fém és a Josephson-átmenet egy megfelelő méretű mikrohíd. Tipikus elrendezés látható a 15a ábrán. A vékonyfilm SQUID-ek előnyei: nem igényelnek mechanikai beállítást és így a stabilitásuk igen jó, továbbá, ha korrózióálló fémből (pl. Nb) készülnek, tartósságuk minden igényt kielégít. Hátrányuk, hogy zajosabbak a pontkontaktussal létrehozott SQUID-eknél. Az elkészítésük is nehezebb a mikrohíd létrehozása miatt, továbbá a Nb párolog-



tatása csak nagyvákuumban lehetséges elektronágyúval (kb.  $10^{-7}$  torr és  $2800^\circ\text{C}$ ). A mikrohidak kritikus áramának hőmérsékletfüggése is jóval nagyobb, mint a pontkontaktusé [16].

Az 5.2. fejezetben már beszéltünk a SQUID-ben létrejövő fluxusváltozás detektálásának módszeréről. Mint említettük az  $L_{rf}$ ;  $C_{rf}$  rezgőkört áramgenerátorosan gerjesztjük a rezonanciafrekvenciáján. A SQUID állapotának, energiadisszipáció-



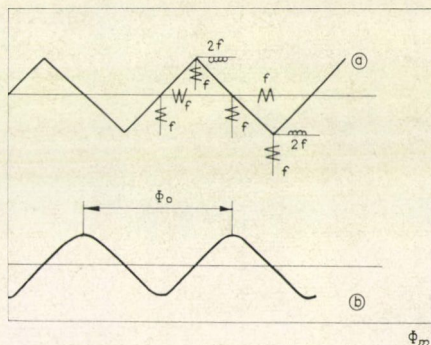
16. ábra. Az RF SQUID elektronikus rendszerek blokkvázlata

jának a megváltozása a rezgőkör impedanciájának a megváltozását vonja maga után. Következésképpen a rezgőkör impedanciájának a mérésével a SQUID-ben levő fluxus detektálása válik lehetővé.

Méréstechnikai célra alkalmas SQUID elektronika látható a 16. ábrán.

Külső fluxus méréséhez az RF szintet a 13. ábra A pontjába állítjuk be. Ha a külső fluxus lineárisan növekszik, a 14. ábra A görbéjének megfelelő feszültségváltozást kapjuk az RF demodulátor kimeneten. Méréstechnikai szempontból sokszor kényelmesebb és hatékonyabb ezt a változást váltakozóáramú módszerrel mérni, így az RF demodulátor driftjét ki lehet küszöbölni, és a zajvédeltséget is növelhetjük. Ennek érdekében az RF tekercsbe olyan amplitúdójú, 1–50 kHz frekvenciájú moduláló jelet vezetünk, amely csúcstól csúcsig  $\Phi_0/2$  amplitúdójú fluxust hoz létre a SQUID-ben (a D. C. SQUID-eknél ugyanezt csináltuk). Az RF demodulátoron megjelenő jelalakokat a 17. ábrán mutatjuk be. Ezt a kimenő jelet erősítés után egy fázisérzékeny detektorral detektáljuk, melynek referenciajelét a moduláló oszcillátor szolgáltatja. A fázisérzékeny detektort pedig egy integráló fokozat követi.

A 16. ábrán feltüntettünk még egy  $R_v$  visszacsatoló ellenállást is. Segítségével



17. ábra. A fázisérzékeny detektálás a) Az RF demodulátoron megjelenő különböző frekvenciájú jelalakok az alkalmazott külső mágneses tér függvényében („f” moduláló jel frekvenciája, amelyből attól függő módon kapunk más-más frekvenciájú jelet a kimeneten, hogy a mérendő mágneses tér a háromszög-karakterisztika mely pontjára állította be az RF demodulátor munkapontját) b) A fázisérzékeny detektort követő integrátor kimenőjele az alkalmazott külső mágneses tér függvényében



negatív visszacsatolást lehet megvalósítani. Ha a SQUID érzékelőjében a mágneses fluxus megváltozik, a műszer kimenete ugyanolyan nagyságú, de ellentétes előjelű fluxust hoz létre az  $L_{rf}$  gerjesztő tekercsen keresztül ennek kompenzálására. Ezt az állapotot nevezzük *fluxus-zárt huroknak* [17]. Ez az elektronikus kapcsolás már nagyon pontos lineáris mérést tesz lehetővé.

A továbbiakban nézzük meg közelebbről mi jellemzi a fluxus-zárt hurkot.

1. *G hurokerősítés* a kimeneten létrehozott mágneses fluxus és a mérendő mágneses fluxus hányadosa:

$$G = \frac{\Phi_{\text{kimenet}}}{\Phi_m},$$

és mivel a zárt hurkú erősítés értéke 1, a hurokerősítés egyben a nyílthurkú erősítést jelenti.

2.  *$\Delta\Phi$  hibajel:* a jelként szereplő mérendő mágneses fluxus és a kompenzáló mágneses fluxus közötti különbség.

Nagysága:

$$\Delta\Phi = \frac{\Phi_m}{G}.$$

A  $\Delta\Phi$  maximális értéke  $\Phi_0/4$  lehet, ennél nagyobb érték esetén a műszer fluxus-zárt állapota megszűnik a SQUID más kvantumállapotba történő ugrása miatt [16].

3. *A dinamikus tartomány* azt adja meg, hogy folyamatosan növelve a mérendő tér fluxusát, milyen értéket képes még kompenzálni az eszköz anélkül, hogy a fluxus-zárt hurokból kiugrana. Más szavakkal: a lineáris mérésre alkalmas tartomány értékét adja meg.

4. *A jelváltozás maximális követési sebessége* (a „slew rate”) azt jelenti, hogy milyen gyors fluxusváltozást lehet lineárisan mérni a fluxus-zárt állapot megszűnése nélkül.

## 6. A SQUID alkalmazásai

Külön kell beszélni a 16. ábrán látható jeltekercsről. Ez egy szupravezető huzalból készített kis tekercs. A gyakorlatban ugyanis a Josephson-átmenetet tartalmazó szupravezető gyűrűvel nem lehet vagy nem célszerű közvetlenül mágneses teret mérni. Az érzékelőt mindig árnyékolni kell a külső zajok ellen (például elsőfajú szupravezetővel). Ezért van szükség az úgynevezett fluxustranzformátorra, amelynek segítségével a mérendő jelet be tudjuk transzformálni a szupravezető gyűrű érzékelő terébe [21], [22]. A fluxustranzformátor két, egymással sorba kapcsolt, szupravezető huzalból készített tekercs (18a ábra). Az egyik tekercset érzékelő tekercsnek, a másikat jeltekercsnek nevezzük. Mivel mindkét tekercs szupravezető, ez az elrendezés szupravezető gyűrűként működik. Ezért, ha az érzékelő tekercs által körbezárt felületen átmenő mágneses fluxus értéke megváltozik, a tekercsrendszerben olyan áram indukálódik, hogy a teljes felületen (beleértve a jeltekercset is) átmenő fluxus értéke ne változzon meg. Az indukált áram által létrehozott mágneses tér pedig, amelyet a SQUID gyűrű érzékel, arányos az áram intenzitásával keresztül a külső térváltozással.

Szokásos olyan elrendezést is készíteni, hogy az érzékelő tekercs nem egy, hanem két, egymással szembe kapcsolt és egymástól néhány cm-re levő, hurokból áll. Ezt



már gradiométernek nevezzük, mert csak a mérendő mágneses tér gradiense érzékeny (18b ábra) [16]. Mivel a közeli jelforrások által létrehozott mágneses tér gradiense sokkal nagyobb mint egy távol levő jelforrásé, ezért ez az elrendezés igen hatásosan alkalmazható a mérés szempontjából nem kívánatos távoli jelforrások zavaró hatásának kiküszöbölésére.

Az ismertett két segédberendezés segítségével a rendkívül érzékeny mérések egész sorát lehet megvalósítani. Például a kvarkok töltésük alapján történő kimutatására [23], [24], mágneses monopólok keresésére [25], gravitációs hullámok detektálására [26], vagy graviméterként ( $\frac{\delta g}{g}$  mérésével földrengés előrejelzésére), girosz-

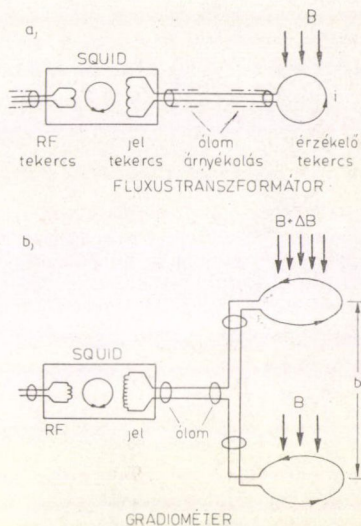
kópként [27] is szívesen alkalmazzák a SQUID-et mint kiegészítő berendezést. Az anyag mágneses tulajdonságainak meghatározása céljából szuszceptibilitás vagy mag mágneses rezonancias mérésekre lehet igen nagy érzékenységgel használni [28]. Geofizikai alkalmazásként a Föld mágneses terének alacsony frekvenciájú ( $< 10$  Hz) fluktuációi mérését említeném, továbbá közet magnetométerként való alkalmazását [29]. A szív, agy, tüdő, vér mágneses tevékenységének a mérésével az orvostudomány területén is nagy lehetőségek vannak az alkalmazására (külső mágneses zajoktól mentes környezetben, a gradiométer jellegétől függően,  $10^{-10}$ – $10^{-11}$  Gauss-t is lehet mérni SQUID berendezés segítségével) [30], [31].

A berendezés alkalmazása igen kis feszültség vagy áram mérésére oly módon történik, hogy az elektromos jelet közvetlenül a jelttekercsbe kell vezetni (a 18a ábrán az érzékelő tekercs eltávolítása után). A műszer érzékenysége feszültségmérőként  $10^{-14}$ – $10^{-16}$  V, áram esetén  $10^{-14}$  A.

## 7. Összefoglalás

Jelen cikkünkben a szupravezető kvantum-interferométerek működési elveivel foglalkoztunk. Ismertettük a Josephson-effektusok lényegét, majd a segítségükkel megvalósítható SQUID rendszereket. Külön tárgyaltuk a DC SQUID-et és az RF SQUID-et. Tárgyalásunkban az utóbbira nagyobb hangsúlyt helyeztünk, mivel világszerte ez az elterjedtebb típus (ugyanis ezen típus érzékenysége a nagyobb, az érzékelőfej elkészítése is könnyebb, mint a DC SQUID-é).

A cikk utolsó részében röviden illusztráltuk azt a széles területét a fizikának, ahol ma már sikeresen alkalmazzák a SQUID-eket (ezek a nagy pontosságot és a nagy érzékenységet megkívánó mérések), majd megemlítettük a mindennapi életben történő alkalmazásait is (orvosi célra történő alkalmazását, geofizikai alkalmazását).



18. ábra. A fluxustranzformátor és a gradiométer sematikus rajza



## IRODALOM

1. *B. D. Josephson*, Phys. Lett. 1, 251, 1962; Adv. Phys. 14, 419, 1965.
2. *Mészáros S.*, Fiz. Szemle, 28, 204, 1978.
3. *R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands*, Mai fizika, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1970, 9. kötet, 147. oldal.
4. *D. R. Tilley, J. Tilley*, Superfluidity and Superconductivity, Van Nostrand Reinhold Comp., London, 1974.
5. *B. S. Deaver és W. M. Fairbank*, Phys. Rev. Lett. 7, 43, 1961.
6. *M. Doll és M. Näbauer*, Phys. Rev. Lett. 7, 51, 1961.
7. *R. de Bruyn Ouboter és A. Th. A. M. de Waele*, Progress in Low Temperature Physics, ed. by *C. J. Gorter* (North-Holland Pub. Comp., Amsterdam, 1970), Vol. 6, chapter 6.
8. *A. Th. A. M. de Waele és R. de Bruyn*, Physica 41, 225, 1969.
9. Fizika 1977, szerk. *Abonyi Iván*, Gondolat Könyvkiadó, Budapest, 1977. 260. oldal.
10. *W. C. Stewart*, Appl. Phys. Lett. 12, 277, 1968.
11. *D. E. McCumber*, J. Appl. Phys. 39, 297, 2503, 3113, 1968.
12. *S. Shapiro*, Phys. Rev. Lett. 11, 80, 1963.
13. *J. Clarke*, Phyl. Mag. 13, 115, 1966.
14. *O. V. Lounasmaa*, Experimental Principles and Methods Below 1 °K, pp. 140—188, Academic Press, London and New York, 1974.
15. *K. Neumaier*, Cryogenics 16, 117, 1976.
16. *W. L. Goodman, V. W. Herterman, L. H. Rorden és W. S. Goree*, Proceedings of the IEEE 61, 20, 1973.
17. *R. P. Giffard, R. A. Webb és J. C. Wheatley*, Journal of Low Temp. Phys. 6, 533, 1972.
18. *J. E. Zimmerman, P. Thiene és J. T. Harding*, J. Appl. Phys. 41, 1572, 1970.
19. *D. B. Sullivan*, NBS Technical note 629.
20. *J. E. Zimmerman*, J. Appl. Phys. 48, 702, 1977.
21. *F. Irie és A. Nakamura*, The present status of application of the Josephson effect, Invited Paper presented at the Sixth Int. Cryog. Eng. Conf.
22. *R. E. Sarwinski*, Cryogenics 17, 671, 1977.
23. *G. S. La Rue, W. M. Fairbank és A. F. Hebard*, Phys. Rev. Lett. 38, 1011, 1977.
24. Physics Today, 7, 17, 1977.
25. *P. H. Eberhard, R. R. Ross és J. D. Taylor*, Rev. Sci. Instr. 46, 362, 1975.
26. *S. Barbanera, P. Carelli, I. Modena és G. L. Romani*, Lett. Nuovo Cimento 20, 635, 1977.
27. *J. C. Gallop és B. W. Petley*, Journal of Physics E. 9, 417, 1976.
28. *E. P. Day*, Phys. Rev. Lett. 29, 540, 1972.
29. *W. S. Goree*, Rev. Geophys. Space Phys. 14, 591, 1976.
30. *J. Ahopelto, P. J. Karp, T. E. Katila, R. Lukander és P. Mäkipää*, in Proc. 14th Int. Conf. Low Temp. Phys. (Otaniemi, Finland, Aug. 14—20, 1975) ed. by *M. Krusius and M. Vuorio*, North-Holland Pub. Comp., Amsterdam, 1975, Vol. 4, P. 262.
31. *Mészáros S., Vad K., Novák D.*, ATOMKI Közlemények, 21, 13, 1979.
32. *S. Dési*, Acta Phys. Hung. 42, 3, 1977.
33. *D. N. Langenberg, D. J. Scalapino és B. N. Taylor*, Proc. IEEE 54, 560, 1966.
34. *C. C. Grimes és S. Shapiro*, Phys. Rev. 169, 397, 1968.
35. *J. Clarke*, in Superconductor Applications: SQUIDS and Machines, ed. by *B. B. Schwartz and S. Foner* (Plenum Press, New York, 1977), chapt. 3.



## KÖNYVISMERTETÉS

U. Müller, K. G. Roesner, B. Schmidt (ed):  
**Recent Developments in Theoretical and Experimental Fluid Mechanics.  
Compressible and Incompressible Flows.**  
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1979. (642 lap)

A könyv, amelyet *Jürgen Zierep* professzornak, a Karlsruhei Egyetem Áramlástan és Áramlás-technikai Gépek Intézete vezetőjének a tiszteletére adtak ki ötvenedik születésnapja alkalmával, a kiváló áramlástan szakember tanítványainak, munkatársainak és tisztelőinek 62 dolgozatát tartalmazza (kb. felerészben angol és felerészben német nyelven). A dedikációt, amely J. Zierep professzor munkásságát méltatja, volt tanítványa és jelenlegi munkatársa: *U. Müller* írta.

A kötetben található dolgozatok az elméleti és kísérleti áramlástan csaknem egész területét átfedik: transzszonikus áramlás, szuperszonikus áramlás, áramlások fúvókákban, kis sűrűségű gázok áramlása, numerikus módszerek alkalmazása a gázdinamikában, hidrodinamikai stabilitás, határrétegek, jet-áramlás, szárnyprofil-elmélet áramlástechnikai gépek, és az utolsó fejezetben: speciális hidrodinamikai problémák. A megértést 380 gondosan és szépen kivitelezett ábra, illetve fénykép segíti.

A szép kiállítású könyv kedves ajándék *Jürgen Zierep* professzornak ötvenedik születésnapjára, de hasznos „ajándék” mindazoknak a fizikusoknak és mérnököknek is, akik hidrodinamikával foglalkoznak.

Szabó János

J. W. Strohbehn (ed.): **Laser Beam Propagation in the Atmosphere.**  
**Topics in Applied Physics. Vol. 25.**  
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1978.

A közeg hatását a rajta keresztülhaladó lézersugáron négy csoportba oszthatjuk: 1. a turbulencia okozta effektusok, 2. a közegben jelenlevő részecskék (köd, eső, por) zavaró hatása, 3. a közeg abszorbeáló hatása, 4. a nagy teljesítményű lézersugár okozta perturbációk visszahatása. A recenzius különösen az 1. effektus vizsgálatát emeli ki, minthogy a turbulencia jellege és az általa okozott effektusok megismerése a mindmáig „misztikus” turbulens állapot megismeréséhez vihet közelebb. Az effektus létezését viszonylag régen tudjuk: a csillagok fényének sok „látszólagos” ingadozása, szabálytalan váltakozása a légkör turbulens viselkedésére, ill. a törésmutató ezáltal okozott kaotikus ingadozásaira vezethető vissza. Az akusztikai hullámok és a hordozó közeg turbulens viselkedése közötti kapcsolattal a negyvenes évek óta több szerző foglalkozott (*A. M. Obakov, V. A. Kraszilnyikov, D. Mintzer, V. I. Tatarszkij*).

A könyv az 1. és 4. effektus elméleti és kísérleti vizsgálatának eredményeivel foglalkozik. A bevezető fejezetben kívül hat — szorosabb értelemben vett szakmai — fejezet következik. A második fejezetben *S. F. Clifford* részletesen ismerteti az elektromágneses hullámnak az atmoszférán való áthaladására vonatkozó klasszikus elméletét. Megtudjuk ebben a fejezetben, melyek az atmoszféra azon legfontosabb tulajdonságai, amelyek az áthaladó lézersugár tulajdonságait döntően befolyásolják. A 2.3. fejezetben a turbulens közegen áthaladó elektromágneses hullám fázis- és amplitúdó-változásairól kapunk részletes információt.

A harmadik fejezetben *J. W. Strohbehn* részletesen diszkutálja azokat az elméleteket, amelyek azokra a hatásokra vonatkoznak, amikor gyenge perturbáció már nem tételezhető fel, vagyis a klasszikus értelemben vett perturbáció-elmélet már nem alkalmazható.

A negyedik fejezet *Gracseva* és *Gurvics* munkáin alapszik: a hosszú hatótávú turbulenciák hatása, skála-paraméterek elmélete a tárgya.

Az első négy fejezet a síkhullámok vagy majdnem síkhullámok turbulens közegbeli terjedésével foglalkozik. A további fejezetek ilyen korlátozást nem tartalmaznak és a lézer-sugaras kommuni-



káció a témájuk. Az utolsó fejezet tárgya különösen modernnek mondható: a nagy intenzitású lézersugár tengelyében jóval nagyobb az intenzitás, mint a szélek közelében és ez termikus „robbanáshoz” vezethet.

A könyv a téma számítástechnikai feldolgozásának ismertetésével zárul. Az egyes fejezetek végén részletes irodalmi ismertetés található. A könyv stílusa dicséretes, témája aktuális és széles körben tarthat érdeklődésre számot. Jól foglalja össze a témára vonatkozó legújabb kísérleti és elméleti eredményeket.

*Szabó János*

**M. A. Van Hove—S. Y. Tong: Surface Crystallography by LEED**  
**Springer Series in Chemical Physics, Vol. 2.**  
**Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1979.**

A felületi kristallográfia kísérleti módszere a LEED (low energy electron diffraction), az utóbbi tíz évben terjedt el szélesebb körben, azóta, amióta a szükséges kísérleti technika és a megfelelő elméleti megalapozás ezt lehetővé tette.

M. A. Van Hove és S. Y. Tong közel 300 oldalas monográfiája a LEED technika gyakorlati alkalmazásaihoz nyújt hasznos segítséget. A könyv tartalmát a címe helyett jobban fejezi ki az alcím: Theory, Computation and Structural Results. Célja ugyanis elsősorban az, hogy részletesen ismertessen egy, a szerzők által kidolgozott számítógépes programot, amellyel számos felületi kristálystruktúra meghatározható a LEED szolgáltatta kísérleti adatokból. Mindehhez természetesen tárgyalnia kell az elektronszóródás legújabb elméleti eredményeit is.

A LEED elméletét a könyv korszerűen, de viszonylag röviden tárgyalja (2. fejezet), ismerteti a többszörös szóródást, a nem geometriai paraméterek szerepét, inelasztikus energiaveszteségek okait, a termikus rácsrezgések befolyását az elektronszóródásra, a tiszta és adszorbeáltatott felületek elektronszóródásának jellegzetességeit stb. Nem foglalkozik azonban a könyv a LEED mérés-technikai vonatkozásaival, és nem közöl szemléltető diffrakciós képeket sem.

A könyv 3. fejezete a programban foglalt alapvető gondolatokat foglalja össze, a továbbiak (4—9. fejezetek) röviden ismertetik az egyes számítási részlépések fizikai tartalmát, részletezik azok matematikai megfogalmazását, végül a megfelelő szubrutin felépítését.

A teljes, FORTRAN nyelven írott program ismertetésével a 10. fejezet foglalkozik. Ez négy független mérési sorozatot igényel és egy feltételezett felületi atomelrendeződési modellt, amelynek számított intenzitáselosztását hasonlíttja a mért adatokkal. A könyv leghosszabb, 11. fejezete közli az összes szükséges programot, számos lehetséges struktúra esetére. A szubrutinok megfelelő kombinálásával az adott feladathoz megfelelő számítógépes program állítható össze.

A szerzők szerint könyvben tárgyalt kiértékelési eljárás lényegesen általánosabban használható, mint a korábban közöltek, és a kristallográfiai adatok mellett más, a felületre jellemző fizikai paraméterek kiszámítását is lehetővé teszi.

Igen hasznos a könyv 12. fejezete, amelyik is összefoglalja az 1978-ig meghatározott és publikált felületi struktúrák jellemző adatait. A mintegy 90 fém, nemfém, vegyület, adszorbeált réteg stb. felületi kristallográfiai jellemzőit több mint 160 közlemény alapján állították össze a szerzők.

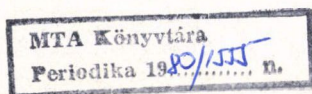
Összefoglalva megállapíthatjuk, hogy a könyv elsősorban a gyakorlati felületanalitikusok számára ajánlható segédkönyvként, a LEED felől tájékozódni kívánóknak a munka első fejezetei adhatnak jó áttekintést. Fontos megemlítenünk, hogy a szubrutinok alkalmasak lehetnek más elektronspektroszkópiai módszerek (fotoelektron, Auger, energiavesztesség stb.) adatainak feldolgozásánál is.

*Riedel Miklós*

**I. M. Yaglom:**  
**A Simple Non-Euclidean Geometry and Its Physical Basis**  
**Heidelberg Science Library**  
**Springer-Verlag**

A könyv alcíme „A Galilei-féle geometria és a Galilei-féle relativitáselmélet egyszerű ismertetése”.

Jaglom professzor a kiváló szovjet geometer mesteri módon vezeti be az olvasót a nem-euklideszi geometriák fogalmába és vizsgálatába egy nagyon egyszerű, de a fizikában nagyon fontos geometria a Galilei-féle geometria segítségével. A könyv nem tételez fel az olvasótól magasabb





szintet, mint a középiskolás matematikai és geometriai fogalmak ismeretét. Mégis gondolatgazdagsága meghaladja sok felsőfokú könyvét.

A könyvet olvasva kristálytisztán bontakozik ki az olvasó előtt, hogy a tér—idő egysége és egységes geometriai tárgyalása Galilei relativitási elvében gyökerezik és Einstein speciális relativitáselméletében már „csak” az az új ismeret jut kifejezésre, hogy a tér—idő geometriája nem a Galilei-féle, hanem a hiperbolikus, Minkowski-féle geometria.

A bevezetésben Klein gondolatait a geometriáról, mechanikáról és a mechanika geometrizálásáról tárgyalja a szerző. Az I. és II. fejezetek elemi, de nem triviális bevezetést adnak a sík Galilei-féle geometriába és az inverz Galilei-féle geometriába, összehasonlítva azt a sík és az inverz Euklideszi geometriával. A záró fejezetben a klasszikus kinematikát a Galilei-féle geometria fizikai alapját relativisztikus kinematika váltja fel. Ez a Minkowski-féle geometriához vezet. A korábbi kérdéseket az új geometria tárgykörében is megvizsgálja. Az A függelék a kilenc féle sík geometriát foglalja össze. A B függelék bemutatja ezeket a geometriákat analitikus modellek segítségével komplex, duális és kettős számokon.

A könyv rendkívül értékes és nagy pedagógiai ereje van, ezért igen hasznos olvasmány a matematikus olvasótáboron túl a fizikusok és középiskolai fizikatanárok számára is. Különösen jó az a tárgyalásmódjában, hogy sok segítő megjegyzést, példát és alkalmazást tartalmaz. Minden fejezet után feladatokat is ad. Némelyik feladat azonban már inkább utat mutat a tapasztaltabb olvasók számára abban, hogy milyen kérdéseket érdemes vizsgálni. Elemi bevezető jellege lehetővé tenné középiskolai matematikai és fizikai szakköri könyvként való használatát. Nagyon jó volna ezért, ha a hazai könyvkiadás is megfontolná ezen mű megjelentetését.

*Horváth Zsolt*





A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója

79-3711 — Szegedi Nyomda — Felelős vezető: Dobó József igazgató

Technikai szerkesztő: Turchányi György — Műszaki szerkesztő: Marton Andor

A kézirat nyomdába érkezett: 1978. IX. 20. — Terjedelem 10,15(A/5) ív







## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Kamarás Katalin</i> : Fizikai-kémiai vizsgálatok elektromosan vezető donor—akceptor sókon....	515
<i>Parragh Levente</i> : Kétfajta leptontöltés egy lehetséges geometriai értelmezése.....	573
<i>Giber János, Riedel Miklós és Sólyom András</i> : Újabb eredmények és lehetőségek a kvantitatív SIMS vizsgálatokban .....	579
<i>Vad Kálmán</i> : Szupravezető kvantum-interferométerek működési elvei .....	599

## KÖNYVISMERTETÉS

<i>U. Müller, K. G. Roesner, B. Schmidt</i> (ed.): Recent Developments in Theoretical and Experimental Fluid Mechanics. Compressible and Incompressible Flows .....	625
<i>J. W. Strohbehn</i> (ed.): Laser Beam Propagation in the Atmosphere.....	625
<i>M. A. Van Hove—S. Y. Tong</i> : Surface Crystallography by LEED .....	626
<i>I. M. Yaglom</i> : A Simple Non-Euclidean Geometry and Its Physical Basis .....	626